



KERNFORSCHUNGSANLAGE JÜLICH  
GESELLSCHAFT MIT BESCHRÄNKTER HAFTUNG  
Institut für Reaktorentwicklung

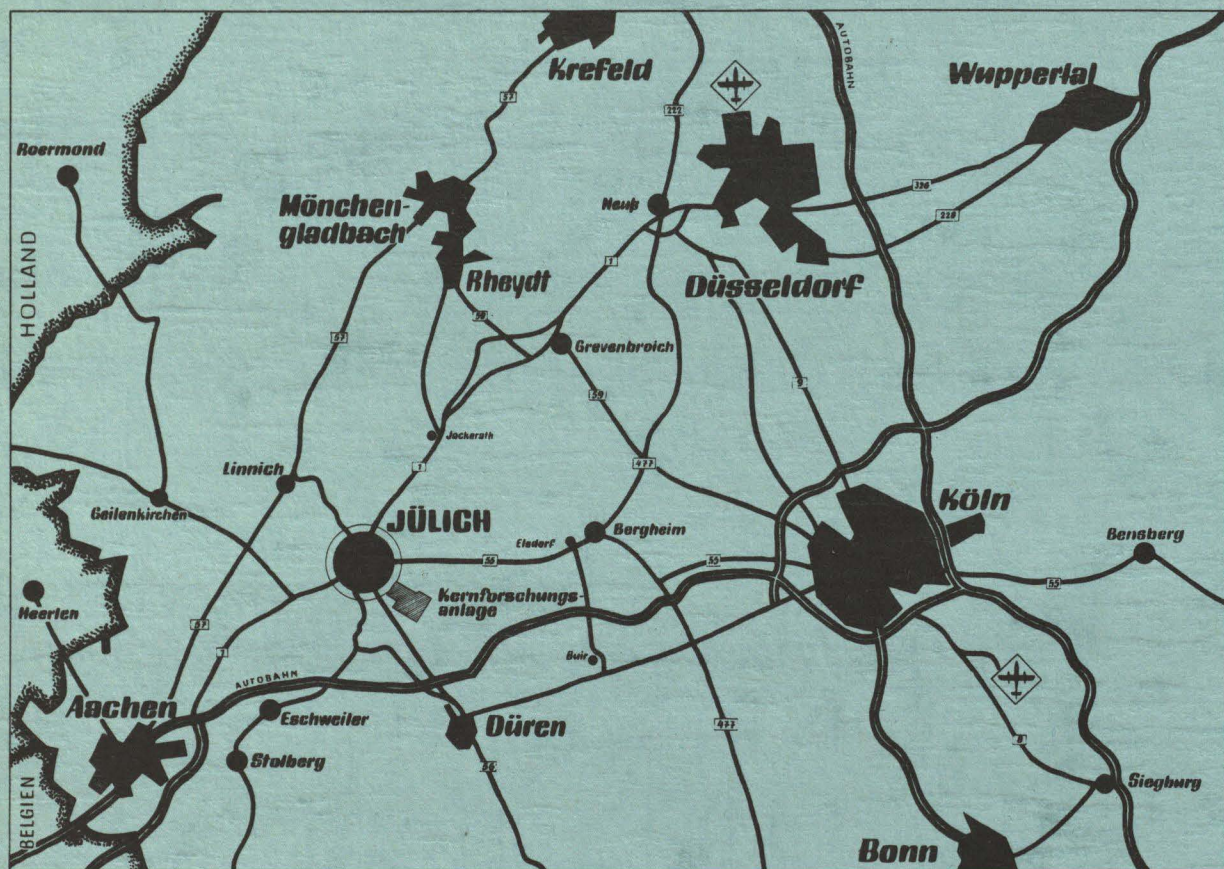
**Über ein numerisches Verfahren zur Lösung  
der zeitunabhängigen Transportgleichung  
für Neutronen**

von  
Georg Lindenmayr

Jül - 764 - RG  
Mai 1971

Als Manuskript gedruckt





# **Berichte der Kernforschungsanlage Jülich – Nr. 764**

Institut für Reaktorentwicklung - Jül - 764 - RG

Dok.: Transport Phenomena - Neutrons  
 Transport Equation - Solution, Numerical  
 Difference Methods

Im Tausch zu beziehen durch: ZENTRALBIBLIOTHEK der Kernforschungsanlage Jülich GmbH,  
 Jülich, Bundesrepublik Deutschland



# **Über ein numerisches Verfahren zur Lösung der zeitunabhängigen Transportgleichung für Neutronen**

von

Georg Lindenmayr

D 82 (Diss. T. H. Aachen)



ÜBER EIN NUMERISCHES VERFAHREN  
ZUR LÖSUNG DER  
ZEITUNABHÄNGIGEN TRANSPORTGLEICHUNG FÜR NEUTRONEN

VON  
G. LINDENMAYR

ZUSAMMENFASSUNG

In dieser Arbeit wird eine diskrete Form der zeitunabhängigen, eindimensionalen Multigruppen-Transportgleichung für Neutronen in Kugelgeometrie und mit im Laborsystem isotroper Streuung gelöst. Analytische Ausgangsgleichung für die Ableitung von Differenzengleichungen ist die integrale Transportgleichung. Zum Differenzen-Problem läßt sich, unabhängig von der gewählten Schritt-  
länge, ein Existenzsatz beweisen: Es gibt einen positiven Eigenwert ( $k_{eff}$ ), der größer ist als die Beträge aller anderen Eigenwerte, und einen zugehörigen positiven Eigenvektor (Neutronenfluß). Eigenwert und Eigenvektor können mit Hilfe eines Iterationsverfahrens berechnet werden. In jedem Iterationsschritt tritt ein lineares Gleichungssystem hoher Ordnung auf, das ebenfalls iterativ gelöst wird. Dazu werden vier verschiedene Iterationsverfahren definiert und untersucht: Ein Punkt-Iterationsverfahren (PI), ein Block-Iterationsverfahren (BI), eine Kombination beider Verfahren, die als ADI-Verfahren für  $\omega = 0$  interpretiert werden kann, und ein Block-SOR-Verfahren. Das Konvergenzverhalten wurde anhand numerischer Beispiele studiert. Sie zeigen, daß das PI lediglich für kleine Schrittlängen und kleine Werte  $s = \sigma^s/\sigma^t$  gut konvergiert. Das BI verhält sich entgegengesetzt: es konvergiert sehr gut für große Schrittlängen und große Werte für  $s$ . ADI( $\omega=0$ )- und SOR( $\omega=1$ )-Verfahren sind in allen Fällen gut konvergent; das ADI-Verfahren konvergiert noch etwas schneller. Die in dieser Arbeit beschriebene Rechenmethode kann unter anderem dazu verwendet werden, Neutronenfluß und  $k_{eff}$  in großen und gut thermalisierten Anordnungen mit Hohlräumen ( $\sigma^t=0$ ) und starken Absorbern zu berechnen.



## SUMMARY

In this report a discrete form of the stationary, one dimensional multigroup transport equation for neutrons is solved. Sphere geometry and isotropic scattering cross sections are assumed. Starting with the integral form of the neutron transport equation a system of difference equations is derived. An existence theorem independent of the mesh size chosen can be proved: There exist a single positive Eigenvalue ( $k_{eff}$ ) which is larger than the absolute value of any other Eigenvalue and a corresponding unique positive Eigenvector (neutron flux). Eigenvalue and the corresponding Eigenvector can be calculated by the power method. In any iteration step a high order system of simultaneous equations must be solved. Four iteration methods are defined and the convergence is proved: a point iteration method (PI), a block iteration method (BI), a combination of the two which can be interpreted as an ADI (alternating direction implicit) - method for the special case  $\omega=0$ , and the block-SOR (successive overrelaxation)-method. Convergence properties of the methods are studied by some numerical examples. It is demonstrated that the PI method is fast only for small mesh sizes and small values  $s = \sigma^S/\sigma^T$ . The BI method has opposite convergence property: it is very fast for large mesh sizes and large  $s$ . The ADI ( $\omega=0$ ) and SOR( $\omega=1$ ) are well convergent methods in any case, the ADI being somewhat superior over SOR. Difference scheme and iteration methods are well suited for calculating neutron flux and  $k_{eff}$  of large thermal assemblies with voids ( $\sigma^T=0$ ) and strong absorbers.





## I n h a l t

1. Einleitung
2. Die zeitunabhängige, eindimensionale Transportgleichung für Neutronen
3. Ableitung von Differenzengleichungen
4. Eigenschaften der Koeffizienten-Matrix
5. Lösung des partiellen Eigenwertproblems
6. Numerische Ergebnisse und Diskussion
7. Anhang
8. Literatur



## 1. Einleitung

Die formelmäßige Lösung der stationären Transportgleichung für Neutronen ist nur in einigen wenigen, ganz speziellen Fällen möglich. Bei den meisten Problemen, die in der Praxis auftreten, muß die Lösung numerisch angenähert werden. Dazu ersetzt man die Differentialgleichung durch eine Differenzgleichung, von der man verlangt, daß sie die analytische Gleichung in einem gewissen Sinne approximiert. Zwar ist die Differenzgleichung im allgemeinen ebenfalls nicht in geschlossener Form lösbar; jedoch kann man die zu einer numerischen Lösung erforderlichen, recht zahlreichen Rechenoperationen von einer Datenverarbeitungsanlage ausführen lassen.

Für die in dieser Arbeit betrachtete diskrete Form der stationären Neutronen-Transportgleichung läßt sich ein Existenzsatz beweisen: Es gibt einen positiven Eigenwert, der größer ist als die Beträge aller anderen Eigenwerte und einen zugehörigen positiven Eigenvektor. Der Existenzsatz hat theoretische und praktische Bedeutung. Nach Birkhoff und Varga/4/ versteht man unter Kritikalität einer Anordnung den Zustand, der durch den größten, positiven Eigenwert bzw. den zugehörigen positiven Eigenvektor beschrieben wird. Er stellt sich nach einer hinreichend großen Zahl von Neutronen-Generationen ein. Die praktische Bedeutung des Existenzsatzes liegt darin, daß er die Grundlage bildet für das in der Reaktorphysik häufig verwendete Quell-Iterationsverfahren.

Differenzenverfahren zur Approximation der Neutronen-Transportgleichung werden seit längerer Zeit verwendet. Die bekanntesten unter ihnen sind die  $S_N$ -Verfahren /1/,/2/. Leider kann man für die  $S_N$ -Differenzgleichungen im allgemeinen keinen Existenzsatz der oben genannten Art beweisen. Ein weiterer Nachteil liegt darin, daß zu ihrer Lösung lediglich Punkt-Iterationsverfahren verwendet werden, die erfahrungsgemäß bei großen Schrittlängen und bei gut thermalisierten



Anordnungen sehr langsam konvergieren. Daher werden in dieser Arbeit zur Lösung des in jeder äußeren Iteration auftretenden linearen Gleichungssystems neben einem Punktiterationsverfahren noch drei Block-Iterationsverfahren untersucht.

## 2. Die zeitunabhängige, eindimensionale Transportgleichung für Neutronen

Die zeitunabhängige (stationäre) Transportgleichung für Neutronen in integro-differenzieller Form lautet

$$(2.1) \quad \vec{\Omega} \nabla \phi(\kappa, \vec{\Omega}, E) + \sigma^t(\kappa, E) \phi(\kappa, \vec{\Omega}, E) = \\ = \frac{1}{\lambda} \chi(\kappa, E) \int_{E'} \sigma^f(\kappa, E') \phi(\kappa, E') dE' + \int_{E'} \sigma^s(\kappa, E' \rightarrow E) \phi(\kappa, E') dE'$$

Hierin ist

$\phi(\kappa, \vec{\Omega}, E) d\kappa d\vec{\Omega} dE$  der Neutronenfluß in einem Phasenraum-Element der Größe  $d\kappa d\vec{\Omega} dE$  an der Stelle  $\kappa$  mit der Energie  $E$  und in Richtung  $\vec{\Omega}$ ,

$\phi(\kappa, E) \equiv \frac{1}{4\pi} \int_{\vec{\Omega}} \phi(\kappa, \vec{\Omega}, E) d\vec{\Omega}$  der winkelgemittelte Fluß,

$\sigma^t(\kappa, E) = \sigma^a(\kappa, E) + \int_{E'} \sigma^s(\kappa, E' \rightarrow E) dE'$  der makroskopische totale Wirkungsquerschnitt,

$\sigma^a(\kappa, E)$  der makroskopische Absorptionsquerschnitt,

$\sigma^s(\kappa, E' \rightarrow E)$  der makroskopische (isotrope) Streuquerschnitt,

$\sigma^f(\kappa, E)$  der makroskopische Spaltungsquerschnitt,

$\chi(\kappa, E)$  das Spaltspektrum,

$\nu$  die mittlere Zahl der pro Spaltung entstehenden Neutronen

und  $\lambda$  der Eigenwert, d.i. der effektive Multiplikationsfaktor.

Sämtliche Wirkungsquerschnitte werden als winkelunabhängig (isotrop) angenommen. Im folgenden soll lediglich die eindimensionale Gleichung in Kugelgeometrie betrachtet werden. Nach Einführung von Kugelkoordinaten und Beschränkung auf die  $r$ -Koordinate erhält man aus (2.1)

$$\begin{aligned}
 (2.2) \quad & \mu \frac{\partial \phi(r, \mu, E)}{\partial r} + \frac{1-\mu^2}{r} \frac{\partial \phi(r, \mu, E)}{\partial \mu} + \sigma^t(r, E) \phi(r, \mu, E) = \\
 & = \frac{1}{\lambda} \chi(r, E) \int_{E'} \nu \sigma^f(r, E') \phi(r, E') dE' + \int_{E'} \sigma^s(r, E' \rightarrow E) \phi(r, E') dE'
 \end{aligned}$$

$\mu$  ist der Cosinus des Winkels  $\vartheta$  zwischen Richtungen von  $\kappa$  und  $\vec{n}$  (siehe Abb. 1).

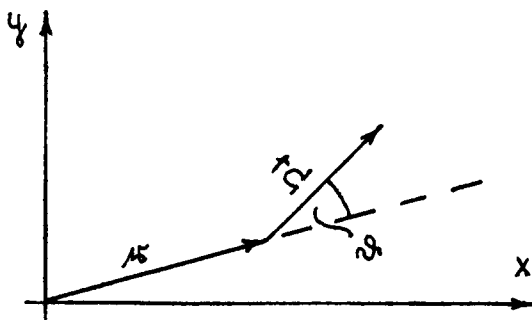


Abb. 1: Definition der Winkelvariablen  $\mu = \cos \vartheta$ .

Der zu Grunde liegende Bereich  $\mathcal{R} \times \mathcal{M} \times \mathcal{E}$  soll folgendermaßen definiert werden:

$r \in \mathcal{R}$  , wenn  $r$  reell und  $0 \leq r \leq R$

$E \in \mathcal{E}$  , wenn  $E$  reell und  $E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$

$\mu \in \mathcal{M}$  , wenn  $\mu$  reell und  $-1 \leq \mu \leq 1$ .

Das räumliche Gebiet  $\mathcal{R}$  soll in eine Anzahl Teilgebiete  $\mathcal{R}_z$ ,  $z \in \{1, \dots, Z\}$  mit den Grenzen  $R_z$  eingeteilt werden,  $R_1 < R_2 < \dots < R_Z < \dots < R_Z = R$ . Die makroskopischen Wirkungsquerschnitte  $\sigma^t(\tau, E)$ ,  $\sigma^a(\tau, E)$ ,  $\sigma^s(\tau, E \rightarrow E)$ ,  $\nu \sigma^f(\tau, E)$  und  $\chi(\tau, E)$  sind nicht negative und beschränkte Funktionen und in  $\mathcal{R}$  stückweise konstant mit Unstetigkeiten an den Stellen  $R_z$ . (2.3)

Der Fluß  $\phi(\tau, \mu, E)$  soll an den Stellen  $R_z$  stetig sein und einer der beiden Randbedingungen genügen

$$(2.4) \quad \begin{aligned} \phi(R, \mu < 0, E) &= 0 && \text{(Vakuum-Randbedingung)} \\ \phi(R, \mu, E) &= \phi(R, -\mu, E) && \text{(Reflexions-Randbedingung)} \end{aligned}$$

Gleichung (2.2) stellt zusammen mit den Bedingungen (2.3) und (2.4) ein Randwertproblem dar. Es wäre interessant, zu wissen, ob es Werte  $\lambda_0$  und Funktionen  $\phi_0(\tau, \mu, E)$  gibt, die die oben genannten Bedingungen erfüllen. Da Eigenwert und Eigenfunktion physikalisch interpretiert werden, wäre es außerdem interessant zu wissen, unter welchen Bedingungen ein positiver Eigenwert und eine positive Eigenfunktion existieren. In einer kürzlich veröffentlichten Arbeit [3] wurde erstmals für eine verallgemeinerte Transportgleichung<sup>(1)</sup> die Existenz eines einfachen, positiven betragsgrößten Eigenwerts und einer zugehörigen eindeutigen, positiven Eigenfunktion bewiesen. Hierbei wurde die starke Annahme gemacht, daß  $\chi(\tau, E) \nu \sigma^f(\tau, E) > 0$  ist; das bedeutet, daß sich überall im Reaktor spaltbares Material befindet.

---

(1) Die Verallgemeinerung liegt in der Annahme einer nicht-lokalen Wechselwirkung für die Spaltung, durch die man die endliche Ausdehnung der Spaltkerne berücksichtigt

$$F(\kappa, E) = \frac{1}{\lambda} \chi(\kappa, E) \frac{1}{\sqrt{2\pi} \cdot s} \int_{E'} \int_{\kappa'} \exp\left(-\frac{(\kappa - \kappa')^2}{2s^2}\right) \nu \sigma^f(\kappa', E') \phi(\kappa', E') d\kappa' dE'$$

Der in der Reaktorphysik üblicherweise verwendete Ausdruck  $F(\kappa, E)$  zur Beschreibung der Spaltungsneutronen folgt daraus für  $s \rightarrow 0$ .



In Abschnitt 4 wird der Existenzsatz für eine diskrete Form der eindimensionalen Transportgleichung unter schwächeren Bedingungen bewiesen. Außerdem wird der Fall diskutiert, daß in einigen Teilgebieten  $\mathcal{R}_z$  der totale Wirkungsquerschnitt  $\sigma^t(\tau, E)$  verschwindet.

Man kann die Gleichung (2.2) leicht in eine Integralgleichung verwandeln. Hierzu führt man an Stelle der beiden Variablen  $\tau$  und  $\mu$  zwei neue Variablen  $x$  und  $y$  ein

$$\begin{aligned} x &= \tau \mu \\ y &= \tau \sqrt{1 - \mu^2} \end{aligned}$$

Bezeichnet man den Fluß in den neuen Koordinaten der Einfachheit halber ebenfalls mit  $\phi$ , also

$$\phi(\tau, \mu, E) \equiv \phi\left(\sqrt{x^2 + y^2}, \frac{x}{\sqrt{x^2 + y^2}}, E\right) \equiv \phi(x, y, E)$$

dann nimmt die Gleichung (2.2) folgende Gestalt an

$$\begin{aligned} (2.5) \quad \frac{\partial \phi(x, y, E)}{\partial x} + \sigma^t(\tau, E) \phi(x, y, E) &= \frac{1}{\lambda} \chi(\tau, E) \int_{E'} \nu \sigma^f(\tau, E') \phi(\tau, E') dE' \\ &+ \int_{E'} \sigma^s(\tau, E' \rightarrow E) \phi(\tau, E') dE' \end{aligned}$$

Den winkelgemittelten Fluß  $\phi(\tau, E)$  erhält man durch Integration längs des Halbkreises  $r$

$$\phi(\tau, E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \phi(x, y = \sqrt{\tau^2 - x^2}, E) dx$$

Den zu Grunde liegenden Bereich  $\mathcal{X} \times \mathcal{Y} \times \mathcal{E}$  wählt man zweckmäßigerweise folgendermaßen

$$y \in \mathcal{Y}, \text{ wenn } y \text{ reell und } 0 \leq y \leq R$$

$$x \in \mathfrak{X} \quad , \text{ wenn } x \text{ reell und } -\sqrt{R^2 - y^2} \leq x \leq \sqrt{R^2 - y^2}$$

$$E \in \mathfrak{E} \quad , \text{ wenn } E \text{ reell und } E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$$

Die Randbedingungen nehmen folgende Gestalt an

$$(2.6) \quad \begin{aligned} \phi(-\sqrt{R^2 - y^2}, y, E) &= 0 && \text{(Vakuum-Randbedingung)} \\ \phi(-\sqrt{R^2 - y^2}, y, E) &= \phi(\sqrt{R^2 - y^2}, y, E) && \text{(Reflexions-Randbedingung)} \end{aligned}$$

Gleichung (2.5) lässt sich formal mit den Nebenbedingungen  $y = \text{const}$  und  $E = \text{const}$  integrieren. Man erhält eine Integralgleichung vom Volterra'schen Typ

$$(2.7) \quad \begin{aligned} \phi(x, y, E) &= \exp \left\langle - \int_{x_0}^x G^t(\xi, E) d\xi \right\rangle \cdot \\ &\left[ \int_{x_0}^x Q(\xi, E) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} G^t(\xi', E) d\xi' \right\rangle d\xi + C(y, E) \right] \end{aligned}$$

mit den Abkürzungen

$$\rho = \sqrt{\xi^2 + y^2}$$

$$Q(\tau, E) \equiv \frac{1}{\lambda} \chi(\tau, E) \int_{E'} \nu G^t(\tau, E') \phi(\tau, E') dE' + \int_{E'} G^s(\tau, E' \rightarrow E) \phi(\tau, E') dE'$$

Die Integrationskonstante  $C$  lässt sich durch die Randbedingungen (2.6) ausdrücken.

Im Fall der Vakuum-Randbedingung erhält man

$$(2.8) \quad \phi(x, y, E) = \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x Q(\xi, E) \exp \left\langle \int_{\xi}^x G^t(\xi', E) d\xi' \right\rangle d\xi$$

und im Fall der Reflexions-Randbedingung

$$\begin{aligned}
 (2.9) \quad \phi(x, y, E) &= \frac{1}{1-L} \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^x Q(\rho, E) \exp \left\langle \int_x^{\xi} G^t(\rho', E) d\xi' \right\rangle d\xi + \\
 &+ \frac{L}{1-L} \int_x^{\sqrt{R^2-y^2}} Q(\rho, E) \exp \left\langle \int_x^{\xi} G^t(\rho', E) d\xi' \right\rangle d\xi \\
 L(y) &\equiv \exp \left\langle \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} G^t(\rho, E) d\xi \right\rangle
 \end{aligned}$$

Die Gleichungen (2.8) und (2.9) sollen in der Umgebung des Punktes  $(0, R)$  untersucht werden. Wegen der Vakuum-Randbedingung ist der linksseitige Grenzwert

$$\lim_{y=R} \phi(-\sqrt{R^2-y^2}, y, E) = 0$$

Für den rechtsseitigen Grenzwert erhält man

$$\begin{aligned}
 \lim_{y=R} \phi(\sqrt{R^2-y^2}, y, E) &= \lim_{y=R} \left\{ \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} Q(\rho, E) \exp \left\langle \int_{\sqrt{R^2-y^2}}^{\xi} G^t(\rho', E) d\xi' \right\rangle d\xi \right\} \\
 &= \lim_{y=R} \left\{ \int_{-\sqrt{R^2-y^2}}^{\sqrt{R^2-y^2}} Q(\rho, E) \exp \left\langle G^t(E) \cdot (\xi - \sqrt{R^2-y^2}) \right\rangle d\xi \right\}
 \end{aligned}$$

Eine rechtsseitige Entwicklung von  $Q(\rho, E)$  an der Stelle  $\xi_0 = 0$  nach  $\xi$  ergibt

$$Q(\rho, E) = Q(y, E) + \xi \frac{\partial Q(\xi, E)}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial y}, \quad 0 < \xi < 1$$

und daher ist

$$\lim_{y=R} \left\{ \frac{Q(y, E)}{G^t} [1 - \exp \langle -2G^t \sqrt{R^2-y^2} \rangle] \right\} = 0$$



Es ist daher sinnvoll,  $\phi(0, R, E) = 0$  zu setzen.

Aus Gleichung (2.9) folgt für den linksseitigen Grenzwert

$$\begin{aligned} \lim_{y \rightarrow R} \phi(-\sqrt{R^2 - y^2}, y, E) &= \lim_{y \rightarrow R} \left\{ \frac{L}{1-L} \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^{\sqrt{R^2 - y^2}} Q(\tau, E) \exp \left\langle \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^{\tau} \sigma^t(\tau', E) d\tau' \right\rangle d\tau \right\} \\ &= \lim_{y \rightarrow R} \frac{L}{1-L} \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^{\sqrt{R^2 - y^2}} Q(\tau, E) \exp \left\langle \sigma^t(E) \cdot (\tau + \sqrt{R^2 - y^2}) \right\rangle d\tau \\ &= \lim_{y \rightarrow R} \frac{\exp(2\sigma^t \sqrt{R^2 - y^2}) - 1}{1 - \exp(-2\sigma^t \sqrt{R^2 - y^2})} \exp(-2\sigma^t \sqrt{R^2 - y^2}) \frac{Q(R, E)}{\sigma^t} = \frac{Q(R, E)}{\sigma^t} \end{aligned}$$

Entsprechend erhält man für den rechtsseitigen Grenzwert ebenfalls

$$\lim_{y \rightarrow R} \phi(\sqrt{R^2 - y^2}, y, E) = \frac{Q(R, E)}{\sigma^t}$$

Daher wird in Gleichung (2.9)  $\phi(0, R, E) = Q(R, E) / \sigma^t(R, E)$  gesetzt. Die im Punkt  $(0, R, E)$  definierten Funktionswerte werden später bei der Aufstellung von Differenzengleichungen benötigt.

Wählt man die Funktionen  $\phi(x, y, E)$  aus einer den oben genannten Gleichungen angepaßten Funktionenklasse, dann sind die Gleichungen (2.2) und (2.7) äquivalent.

### 3. Ableitung von Differenzengleichungen

Sowohl die Integro-Differentialgleichung (2.2) als auch die Integralgleichung (2.7) bzw. (2.8) können zur Ableitung von Differenzengleichungen verwendet werden. Bezüglich der Energievariablen kann man wie folgt verfahren. Der in Frage kommende Energiebereich  $E_{\min} \leq E \leq E_{\max}$  wird in eine Anzahl  $G$  Teilintervalle  $\Delta E_g$ ,  $g \in \{1, \dots, G\}$  geteilt,

$$E_{\min} = E_{G+1} < E_G < \dots < E_g < \dots < E_1 = E_{\max}$$

$$\Delta E_g \equiv E_{g+1} - E_g, \quad \sum_g \Delta E_g = E_{\max} - E_{\min}$$

Jedem Teilintervall wird durch

$$(3.1) \quad \phi_g(\tau, \mu) \equiv \int_{\Delta E_g} \phi(\tau, \mu, E) dE, \quad g \in \{1, \dots, G\}$$

ein Fluß  $\phi_g$  zugeordnet. Durch Integration der Gleichung (2.2) in einem Teilintervall  $\Delta E_g$  erhält man

$$\mu \frac{\partial \phi_g}{\partial \tau} + \frac{1-\mu^2}{\tau} \frac{\partial \phi_g}{\partial \mu} + G_g^t \phi_g = Q_g$$

$$\phi_g \equiv \phi_g(\tau, \mu)$$

$$Q_g \equiv \int_{\Delta E_g} Q(\tau, E) dE$$

mit dem energie-gemittelten totalen Wirkungsquerschnitt

$$G_g^t(\tau, \mu) \equiv \frac{\int_{\Delta E_g} G^t(\tau, E) \phi(\tau, \mu, E) dE}{\int_{\Delta E_g} \phi(\tau, \mu, E) dE}$$

Diese Mittelung ist jedoch unbefriedigend, da sie winkelabhängig ist, während der totale Material-Querschnitt  $G^t(\tau, E)$  winkelunabhängig ist. Durch Integration der Gleichung (2.8) gelangt man zu einer anderen plausiblen Mittelungsvorschrift

$$\begin{aligned} \int_{\Delta E_g} \phi(x, y, E) dE &= \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x \int_E^{\infty} Q(r, E) \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^r \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle dE d\mathcal{F} \\ &= \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x \frac{\mathcal{F}}{-\sqrt{R^2 - y^2}} \frac{\Delta E_g}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} Q(r, E) dE d\mathcal{F} \end{aligned}$$

Verlangt man zusätzlich, daß die Integranden für alle Argumente  $\mathcal{F}$  gleich sind, dann ist die Gleichung erfüllt, und man erhält die Mittelungsvorschrift

$$(3.2) \quad \frac{\int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x \frac{\Delta E_g}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} Q(r, E) \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^r \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle dE d\mathcal{F}}{\int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x \frac{\Delta E_g}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} Q(r, E) dE d\mathcal{F}} \equiv \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle \equiv \frac{\int_{\Delta E_g} Q(r, E) \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^r \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle dE}{\int_{\Delta E_g} Q(r, E) dE}$$

Im allgemeinen sind die Funktionen  $\phi(r, \mu, E)$ ,  $\phi(r, E)$  und  $Q(r, E)$  in den Variablen nicht separierbar. Daher fällt die Ortsabhängigkeit bei der Mittelung nicht heraus. Es ist klar, daß die energie-gemittelten Querschnitte selbst dann noch ortsabhängig sind, wenn die Material-Querschnitte  $\sigma(r, E)$  räumlich konstant sind, wie z.B. in den einzelnen Gebieten eines Reaktors. Will man den Mittelwert durch einen von der gesuchten Funktion unabhängigen Ausdruck approximieren, dann muß man sich mit einer Näherung nullter Ordnung begnügen.

$$\begin{aligned} (3.3) \quad \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^x \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle &= \frac{\int_{\Delta E_g} \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^r \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle [Q(r, E_g) + O(\Delta E_g)] dE}{\int_{\Delta E_g} [Q(r, E_g) + O(\Delta E_g)] dE} \\ &= \frac{\frac{1}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^r \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle dE + O(\Delta E_g)}{1 + O(\Delta E_g)} = \frac{1}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} \exp \left\langle - \int_{-\sqrt{R^2 - y^2}}^r \sigma_g^t(r', E) dr' \right\rangle dE + O(\Delta E_g) \end{aligned}$$

woraus folgt

$$-\int G_q^t(p) d\mathbf{p} = \ln \left[ \frac{1}{\Delta E_q} \int_{\Delta E_q} \exp \langle -G^t(p, E) d\mathbf{p} \rangle dE + O(\Delta E_q) \right]$$

Entwickelt man den Wirkungsquerschnitt an der Stelle  $E_g$  nach Potenzen von  $E$ , dann ist

$$\begin{aligned} -\int G_q^t(p) d\mathbf{p} &= -\int G^t(p, E_g) d\mathbf{p} + \\ &+ \ln \left[ \frac{1}{\Delta E_q} \int_{\Delta E_q} \exp \langle -(E-E_g) \frac{\partial}{\partial E} \int G^t(p, E_g) d\mathbf{p} \rangle dE + O(\Delta E_q^2) \right] + O(\Delta E_q) \end{aligned}$$

Nach Entwicklung der e-Funktion und der ln-Funktion folgt

$$\begin{aligned} -\int G_q^t(p) d\mathbf{p} &= -\frac{1}{\Delta E_q} \int \int G^t(p, E_g) dE d\mathbf{p} - \frac{1}{\Delta E_q} \int \int (E-E_g) \frac{\partial}{\partial E} G^t(p, E_g) dE d\mathbf{p} + O(\Delta E_q) \\ &= -\int \frac{1}{\Delta E_q} \int G^t(p, E) dE d\mathbf{p} + O(\Delta E_q) \end{aligned}$$

Eine hinreichende Bedingung für die letzte Gleichung ist wiederum

$$(3.4) \quad G_q^t(r) = \frac{1}{\Delta E_q} \int_{\Delta E_q} G^t(r, E) dE + O(\Delta E_q) .$$



Integriert man statt (2.8) die Gleichung (2.9), dann gelangt man mit Hilfe einer ähnlichen hinreichenden Bedingung zum gleichen Ergebnis. Durch Integration von  $Q(r, E)$  im Intervall  $\Delta E_g$  erhält man für die übrigen Wirkungsquerschnitte

$$(3.5) \quad \chi_g(\tau) \equiv \int_{\Delta E_g} \chi(\tau, E) dE, \quad \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \chi(\tau, E) dE = \sum_g \int_{\Delta E_g} \chi(\tau, E) dE = \sum_g \chi_g(\tau) = 1$$

$$(3.6) \quad \nu G_g^f(\tau) \equiv \frac{\int_{\Delta E_g} \nu G^f(\tau, E) \phi(\tau, E) dE}{\int_{\Delta E_g} \phi(\tau, E) dE} = \frac{1}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} \nu G^f(\tau, E) dE + O(\Delta E_g)$$

$$(3.7) \quad G_{gg'}^S(\tau) \equiv G_{g'+g}^S(\tau) \equiv \frac{\int_{\Delta E_g} \int_{\Delta E_{g'}} G^S(\tau, E'+E) \phi(\tau, E') dE' dE}{\int_{\Delta E_{g'}} \phi(\tau, E') dE'} \\ = \frac{1}{\Delta E_g} \int_{\Delta E_g} \int_{\Delta E_{g'}} G^S(\tau, E'+E) dE dE' + O(\Delta E_g)$$

Diese Querschnitte stimmen mit denen an der Integro-Differentialgleichung (2.2) definierten überein. Die obigen Überlegungen zeigen, daß die Approximation der energie-gemittelten Wirkungsquerschnitte durch flußunabhängige Querschnitte lediglich von nullter Ordnung ist. Um befriedigende Ergebnisse zu erhalten, müßte man eine sehr feine Intervallteilung wählen, was einen hohen Rechenaufwand bedeuten würde.

In der Praxis faßt man daher einige Teilintervalle zu einer "Gruppe" zusammen und definiert unter Verwendung physikalisch plausibler Flußverläufe einen "Gruppen"-Querschnitt. Wegen Einzelheiten muß auf die einschlägige Literatur verwiesen werden /5/ S. 330.

Die Integralgleichung (2.7) läßt sich in folgender Form schreiben

$$(3.8) \quad \phi_g(x, y) = \exp \left\langle - \int_{x_0}^x \sigma_g^t(\xi) d\xi \right\rangle \left[ \int_{x_0}^x Q_g(\eta) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\eta} \sigma_g^t(\xi) d\xi \right\rangle d\eta + C_g(y) \right], \quad g \in \{1, \dots, G\}$$

$$Q_g(\eta) = \frac{1}{\lambda} \chi_g(\eta) \sum_{g'} \nu \sigma_{gg'}^f(\eta) \phi_{g'}(\eta) + \sum_{g'} \sigma_{gg'}^s(\eta) \phi_{g'}(\eta)$$

$$\rho = \sqrt{\eta^2 + y^2}$$

Als diskreten Ersatz der Integralgleichung (2.7) bzgl. der Energie soll Gleichung (3.8) mit energie-gemittelten Querschnitten (3.4) - (3.7) gewählt werden, bei denen man das Landau'sche Symbol  $\mathcal{O}(\Delta E_g)$  wegläßt.

Bezüglich der beiden Variablen  $x$  und  $y$  verfährt man wie folgt. In der  $x, y$ -Ebene wird ein Maschennetz konstruiert, indem man den Variablen  $r$  und  $y$  I diskrete Werte zuordnet, und zwar

$$\begin{aligned} r &= r_i, \quad i \in \{1, \dots, I\} \\ y &= y_j, \quad j \in \{1, \dots, I\} \end{aligned}$$

Man vermeidet Schwierigkeiten an der Stelle  $x = 0$ , wenn man  $y_j = r_j$ ,  $j \in \{1, \dots, I\}$  setzt. Dann ist

$$x_{ij} = \sqrt{r_i^2 - y_j^2}$$

$$\mu_{ij} = \frac{1}{r_i} \sqrt{r_i^2 - y_j^2}, \quad i \in \{1, \dots, I\}, \quad j \in \{1, \dots, I\}$$

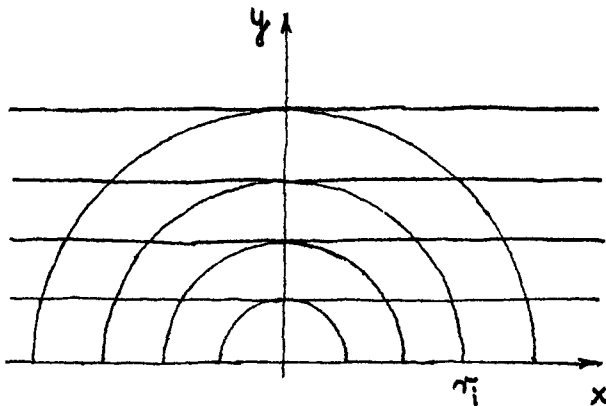


Abb.2: Gitter in der x,y-Ebene.

Die  $r_i$  werden durch konzentrische Halbkreise und die  $y_j$  durch Parallelen zur x-Achse dargestellt (Abb. 2). Jeder Schnitt- oder Berührungspunkt ist ein Gitterpunkt. Bei  $I$  räumlichen Stützstellen  $r_i$  gibt es  $I^2$  Gitterpunkte in der x,y-Ebene. Der diskrete Bereich besteht daher aus folgendem Gitter

$$\mathcal{X}_\Delta \times \mathcal{Y}_\Delta \times \mathcal{E}_\Delta \equiv \{ \pm |x_{ij}|, y_{ij}, E_g \mid i \in \{1, \dots, I\}, j \in \{1, \dots, J\}, g \in \{1, \dots, G+1\} \}$$

Das räumliche Gebiet  $\mathcal{R}_\Delta \equiv \{ r_i \mid i \in \{1, \dots, I\} \}$  besteht im allgemeinen aus mehreren Teilgebieten, die bis auf das innerste die Form konzentrischer Kugelschalen haben. Die  $r$ -Variable soll so diskretisiert werden, daß auf jede Gebietsgrenze  $R_z$  eine radiale Stützstelle  $r_{Iz}$  fällt, also  $r_{Iz} = R_z, z \in \{1, \dots, Z\}$  mit  $0 = |_0 < |_1 < \dots < |_Z < \dots < |_Z = |$ . Jedem radialen Intervall  $r_{i+1} - r_i$  soll durch

$$n_i = z, \quad |_{z-1} < i \leq |_z, \quad z \in \{1, \dots, Z\}, \quad i \in \{1, \dots, I-1\}$$

ein Gebietsindex  $n_i$  zugeordnet werden.

Die folgenden Überlegungen beziehen sich auf die  $g$ -te Energiegruppe. Der Gruppen-Index  $g$  wird daher der Einfachheit halber vorübergehend weggelassen.

Schreibt man die Integralgleichung (3.8) für die beiden benachbarten Maschenpunkte  $x_{ij}$  und  $x_{i+1j}$  hin, dann ist

$$\phi(x_{ij}, y_j) = \exp \left\langle - \int_{x_0}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle \left[ \int_{x_0}^{x_{ij}} Q(\xi) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} \sigma^t(\xi') d\xi' \right\rangle d\xi + C(y_j) \right]$$

oder

$$\phi(x_{ij}, y_j) \exp \left\langle - \int_{x_{ij}}^{x_{i+1j}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle = \exp \left\langle - \int_{x_0}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle \left[ \int_{x_0}^{x_{i+1j}} Q(\xi) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} \sigma^t(\xi') d\xi' \right\rangle d\xi + C(y_j) \right]$$

und

$$\phi(x_{i+1j}, y_j) = \exp \left\langle - \int_{x_0}^{x_{i+1j}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle \left[ \int_{x_0}^{x_{i+1j}} Q(\xi) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} \sigma^t(\xi') d\xi' \right\rangle d\xi + C(y_j) \right]$$

oder

$$\phi(x_{i+1j}, y_j) \exp \left\langle - \int_{x_{i+1j}}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle = \exp \left\langle - \int_{x_0}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle \left[ \int_{x_0}^{x_{i+1j}} Q(\xi) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} \sigma^t(\xi') d\xi' \right\rangle d\xi + C(y_j) \right]$$

Subtrahiert man die Gleichungen paarweise voneinander, dann fällt die "Integrationskonstante" heraus, und man erhält folgende zwei Gleichungen

$$\begin{aligned} \phi(x_{ij}, y_j) - \phi(x_{i+1j}, y_j) \exp \left\langle - \int_{x_{i+1j}}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle = \\ = \exp \left\langle - \int_{x_0}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi' \right\rangle \int_{x_{i+1j}}^{x_{ij}} Q(\xi) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} \sigma^t(\xi') d\xi' \right\rangle d\xi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \phi(x_{i+1j}, y_j) - \phi(x_{ij}, y_j) \exp \left\langle - \int_{x_{ij}}^{x_{i+1j}} \sigma^t(\xi) d\xi \right\rangle = \\ = \exp \left\langle - \int_{x_0}^{x_{ij}} \sigma^t(\xi) d\xi \right\rangle \int_{x_{ij}}^{x_{i+1j}} Q(\xi) \exp \left\langle \int_{x_0}^{\xi} \sigma^t(\xi') d\xi' \right\rangle d\xi \end{aligned}$$

Da der totale Querschnitt  $\sigma^t(\xi) \equiv \sigma_{n_i}^t$  in jedem Teilintervall konstant ist, kann man schreiben

$$\begin{aligned} (3.9) \quad \phi(x_{i+1j}, y_j) - \phi(x_{ij}, y_j) \exp \left\langle - \sigma_{n_i}^t (x_{ij} - x_{i+1j}) \right\rangle = \\ = \int_{x_{i+1j}}^{x_{ij}} Q(\xi) \exp \left\langle - \sigma_{n_i}^t (x_{ij} - \xi) \right\rangle d\xi, \quad x \leq 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (3.10) \quad \phi(x_{i+1j}, y_j) - \phi(x_{ij}, y_j) \exp \left\langle - \sigma_{n_i}^t (x_{i+1j} - x_{ij}) \right\rangle = \\ = \int_{x_{ij}}^{x_{i+1j}} Q(\xi) \exp \left\langle - \sigma_{n_i}^t (x_{i+1j} - \xi) \right\rangle d\xi, \quad x > 0 \end{aligned}$$

Bei der sukzessiven Berechnung der Neutronenflüsse aus den Gleichungen (3.9) und (3.10) mit Hilfe einer Datenverarbeitungsanlage muß man darauf achten, daß die Rundungs- und Abbruchfehler nicht anwachsen. Daher sollen die Gleichung (3.9) zur Berechnung der Flüsse für  $x_{ij} \leq 0$  und die Gleichung (3.10) für  $x_{ij} > 0$  verwendet werden.

Im Unterschied zu den sonst üblichen Differenzenverfahren soll hier nicht die gesuchte Funktion  $\phi(x, y)$ , sondern der gemittelte Fluß  $\phi(r) = \frac{1}{2\tau} \int \phi(x, y) dx$  entwickelt werden. Unter der Voraussetzung, daß  $\phi(r)$  in der Umgebung des Punktes  $r_i$  dreimal stetig differenzierbar ist, erhält man

$$\begin{aligned}\phi(r) &= \phi(r_i) + (r-r_i) \left( \frac{\partial \phi(r)}{\partial r} \right)_{r_i} + \frac{(r-r_i)^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi(r)}{\partial r^2} \right)_{r_i} + R_2(r) \\ &= \phi(r_i) + \frac{(r-r_i)^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right)_{r_i} + R'_2(r), \quad R'_2(r) = R_2(r) + (r-r_i) \left( \frac{\partial \phi}{\partial r} \right)_{r_i}\end{aligned}$$

Der lineare Anteil wird zum Restglied geschlagen; dabei wird angenommen, daß der quadratische Anteil überwiegt. Eine realistische Abschätzung des Restglieds ist im allgemeinen nicht möglich, da Schranken für die Ableitungen von  $\phi(r)$  nicht bekannt sind. Man kommt wohl nicht umhin, diese Annahme durch die Erfahrung rechtfertigen zu lassen. Als ein Hinweis kann folgende Überlegung dienen: für große Anordnungen bzw. Gebiete (groß im Vergleich zur mittleren freien Weglänge der Neutronen) ist die Diffusionsgleichung eine gute Näherung. In einfachen Fällen ist diese Gleichung in Kugelgeometrie analytisch lösbar, und ihre Lösungen sind gerade Funktionen. In kleinen Gebieten oder in der Nähe von Gebietsgrenzen kann man das Restglied dadurch verringern, daß man kleinere Maschenweiten wählt, ohne daß dabei die Zahl der Maschenpunkte zu groß wird.

$\frac{1}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right)_{r_i}$  kann durch den Funktionswert an der Stelle  $r_{i+1}$  eliminiert werden.

$$\phi(r_{i+1}) = \phi(r_i) + \frac{(r_{i+1}-r_i)^2}{2} \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} \right)_{r_i} + R_2(r_i)$$

$$\phi(r) = \phi(r_i) + \left( \frac{r-r_i}{r_{i+1}-r_i} \right) [\phi(r_{i+1}) - \phi(r_i)] + R_2'' , \quad R_2'' \equiv R_2'(r) - R_2'(r_{i+1}) \left( \frac{r-r_i}{r_{i+1}-r_i} \right)^2$$

Denkt man sich die Entwicklung für jede Energiegruppe hingeschrieben, dann kann man

$$Q_g(r) = Q_g(r_i) + \left( \frac{r-r_i}{r_{i+1}-r_i} \right)^2 [Q_g(r_{i+1}) - Q_g(r_i)] + R_g$$

berechnen, wobei



$$R_g \equiv \frac{1}{\lambda} \chi_g \sum_{g'} \sigma_{g'}^f R_{g'}^{\#} + \sum_{g'} \sigma_{g'g}^s R_{g'}^{\#}$$

ist. Setzt man diesen Ausdruck für  $Q_g(r)$  in die Gleichungen (3.9) und (3.10) ein, dann erhält man nach einigen Zwischenrechnungen

$$\int_{x_{i+1j}}^{x_{ij}} Q_g(\varphi) \exp \langle -\sigma_{g'}^t (x_{ij} - \varphi) \rangle d\varphi = \frac{1}{\sigma_{g'n_i}^t} [(1 - Z_{gij}^-) Q_g(\tau_i) + (Z_{gij}^- - E_{gij}) Q_g(\tau_{i+1})] + R_{gij}^-$$

$$R_{gij}^- \equiv \int_{x_{i+1j}}^{x_{ij}} R_g(\varphi) \exp \langle -\sigma_{g'n_i}^t (x_{ij} - \varphi) \rangle d\varphi$$

$$\int_{x_{ij}}^{x_{i+1j}} Q_g(\varphi) \exp \langle -\sigma_{g'n_i}^t (x_{i+1j} - \varphi) \rangle d\varphi = \frac{1}{\sigma_{g'n_i}^t} [(1 - Z_{gij}^+) Q_g(\tau_i) + (Z_{gij}^+ - E_{gij}) Q_g(\tau_{i+1})] + R_{gij}^+$$

$$R_{gij}^+ \equiv \int_{x_{ij}}^{x_{i+1j}} R_g(\varphi) \exp \langle -\sigma_{g'n_i}^t (x_{i+1j} - \varphi) \rangle d\varphi$$

Die Berücksichtigung des quadratischen Terms in der Potenzreihe hat zur Folge, daß die Koeffizienten  $Z_{ij}^-$ ,  $Z_{ij}^+$  und  $E_{ij}$  explizit berechnet werden können. Sie lauten

$$Z_{gij}^- \equiv \frac{2}{(\sigma_{g'n_i}^t)^2 (\tau_{i+1}^2 - \tau_i^2)} [(1 + \sigma_{g'n_i}^t |x_{i+1j}|) (1 - E_{gij}) - \sigma_{g'n_i}^t \Delta x_{ij}]$$

$$Z_{gij}^+ \equiv \frac{2}{(\sigma_{g'n_i}^t)^2 (\tau_{i+1}^2 - \tau_i^2)} [(\sigma_{g'n_i}^t x_{ij} - 1) (1 - E_{gij}) + \sigma_{g'n_i}^t \Delta x_{ij}]$$

$$E_{gij} \equiv \exp(-\sigma_{g'n_i}^t \Delta x_{ij}), \quad \Delta x_{ij} \equiv |x_{i+1j} - x_{ij}|, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}, \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

Den gemittelten Fluß  $\phi(r_i)$  erhält man aus

$$\phi(\tau_i) = \frac{1}{2\tau_i} \int_{-\tau_i}^{\tau_i} \phi(x, y) dx = \sum_j \alpha_{ij} (\phi^-(x_{ij}, y_j) + \phi^+(x_{ij}, y_j)) + R_i$$

Hierbei kann eine der üblichen Integrationsformeln, z.B. die Trapezformel, verwendet werden. Die Gewichte  $\alpha_{ij}$  sind dann positiv und erfüllen die Nebenbedingung

$$\sum_j \alpha_{ij} = \frac{1}{2}$$

Somit erhält man folgende Umformung der Gleichung (3.8)

$$(3.11) \quad \phi_g^-(x_{ij}, y_j) = \phi_g^-(x_{i+1j}, y_j) \exp(-\Delta) + \frac{1}{\sigma_{gn_i}^t} [(1 - Z_{gij}^-) Q_g(\tau_i) + (Z_{gij}^- - E_{gij}) Q_g(\tau_{i+1})] + R_{gij}^-, x_{ij} \leq 0$$

$$(3.12) \quad \phi_g^+(x_{i+1j}, y_j) = \phi_g^+(x_{ij}, y_j) \exp(-\Delta) + \frac{1}{\sigma_{gn_i}^t} [(1 - Z_{gij}^+) Q_g(\tau_{i+1}) + (Z_{gij}^+ - E_{gij}) Q_g(\tau_i)] + R_{gij}^+, x_{ij} > 0$$

$$\Delta \equiv \sigma_{gn_i}^t / |x_{i+1j} - x_{ij}|$$

Als diskreten Ersatz der Gleichung (3.8) sollen die beiden Gleichungen (3.11) und (3.12) mit  $R_{gij}^- = 0$ ,  $R_{gij}^+ = 0$  und  $R_i = 0$  genommen werden. Es ist zweckmäßig, sämtliche Flüsse, die auf demselben Halbkreis liegen, mit dem gleichen Index  $i$  zu bezeichnen. Setzt man noch  $\phi_{gij}^- \equiv \phi_g^-(x_{ij} \leq 0, y_j)$ ,  $\phi_{gij}^+ \equiv \phi_g^+(x_{ij} > 0, y_j)$  und  $Q_{gi} \equiv Q_g(\tau_i)$ , dann ist

$$(3.13) \quad \left. \begin{aligned} \phi_{gij}^- &= E_{gij} \phi_{gi-1j}^- + \frac{1}{\sigma_{gn_i}^t} [B_{gij}^- Q_{gi} + C_{gij}^- Q_{gi+1}], \quad i \in \{1, \dots, I-1\} \\ \phi_{gij}^+ &= E_{gi-1j} \phi_{gij}^+ + \frac{1}{\sigma_{gn_{i-1}}^t} [B_{gi-1j}^+ Q_{gi} + C_{gi-1j}^+ Q_{gi-1}], \quad i \in \{2, \dots, I\} \end{aligned} \right\} \begin{matrix} j \in \{1, \dots, J\}, g \in \{1, \dots, G\} \end{matrix}$$

$$\begin{aligned} B_{gij}^- &\equiv 1 - Z_{gij}^-, & C_{gij}^- &\equiv Z_{gij}^- - E_{gij} \\ B_{gi-1j}^+ &\equiv 1 - Z_{gi-1j}^+, & C_{gi-1j}^+ &\equiv Z_{gi-1j}^+ - E_{gi-1j} \end{aligned}$$

Die Koeffizienten  $E_{gij}$ ,  $B_{gij}^-$ ,  $B_{gij}^+$ ,  $C_{gij}^-$  und  $C_{gij}^+$  werden im Anhang näher untersucht. Verlangt man, daß der Fluß an der Stelle  $x = 0$  stetig ist, dann gilt

$$\phi_{gii}^+ = \phi_{gii}^- , i \in \{1, \dots, I\}$$

Die Randbedingungen (2.6) lauten in diskreter Form

$$\phi_{g1j}^- = 0 , j \in \{1, \dots, J\} \quad \text{Vakuum-Randbedingung}$$

$$(3.14) \quad \begin{aligned} \phi_{g1j}^- &= \phi_{g1j}^+ , j \in \{1, \dots, J-1\} \\ \phi_{g1J}^- &= \phi_{g1J}^+ = \frac{1}{\sigma_{gn_{J-1}}} Q_{g1} \end{aligned} \quad \text{Reflexions-Randbedingung}$$

Eine Lösung des Differenzen-Randwertproblems (3.13), (3.14) soll im Gitter  $X_{\Delta} \times Y_{\Delta} \times Z_{\Delta}$  gesucht werden.

Bemerkung. In /6/ wird die weniger plausible Approximation  $\phi(r) \sim \chi$  in  $(x_{ij}, x_{i+1j})$  verwendet. Sie führt zu den einfacheren Koeffizienten

$$Z_{gij} = \frac{1 - E_{gij}}{\sigma_{gn_i}^t \Delta x_{ij}} , B_{gij}^- = B_{gij}^+ = 1 - Z_{gij} , C_{gij}^- = C_{gij}^+ = Z_{gij} - E_{gij}$$

die ebenfalls überall positiv sind und zwischen null und eins liegen. Numerische Untersuchungen zeigen jedoch, daß diese Approximation zu ungenau ist; sie wurde daher nicht weiter verwendet.

Bisher wurde stets angenommen, daß der totale Wirkungsquerschnitt im ganzen Reaktor von null verschieden ist. Die Annahme, daß  $\sigma_{gn_i}^t = 0$  ist in irgendwelchen Teilgebieten des Reaktors, scheint physikalisch unsinnig zu sein, da auch in Reaktor-Hohlräumen Gas oder Dampf vorhanden ist. Immerhin kann jedoch der totale Wirkungsquerschnitt in solchen Hohlräumen um einige Größenordnungen geringer sein als in den übrigen Reaktorgebieten, und es wäre daher beruhigend zu wissen, ob noch eine positive Lösung existiert für den Fall, daß

der totale Wirkungsquerschnitt in einigen Teilbereichen des Reaktors verschwindet. Außerdem erscheint es sinnvoll,  $\sigma_{gn_i}^t = 0$  in solchen Hohlräumen zu setzen, deren Abmessungen kleiner sind als die mittlere freie Weglänge der Neutronen in ihnen.

Es sei  $\sigma_{gn_i}^t = 0$ ,  $|_{z-1} \leq i < |_z$ . Dann folgt aus Gleichung (2.5)

$$\frac{\partial \phi(x, y, E)}{\partial x} = 0 \quad \rightsquigarrow \quad \phi(x, y, E) = f(y, E)$$

mit einer willkürlichen Funktion  $f(y, E)$  oder in Form von Differenzengleichungen

$$\phi_{gij}^- = \phi_{gi+1j}^-, \quad |_{z-1} \leq i < |_z, \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

$$\phi_{gij}^+ = \phi_{gi-1j}^+, \quad |_{z-1} < i \leq |_z, \quad j \in \{1, \dots, i-1\}$$

Durch Vergleich mit den Differenzengleichungen (3.13) folgt

$$E_{gij} = 1, \quad B_{gij}^- = 0, \quad C_{gij}^- = 0, \quad |_{z-1} \leq i < |_z, \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

$$E_{gi-1j} = 1, \quad B_{gi-1j}^+ = 0, \quad C_{gi-1j}^+ = 0, \quad |_{z-1} < i \leq |_z, \quad j \in \{1, \dots, i-1\}$$

Zu diesen Gleichungen treten noch die Stetigkeitsbedingungen und die Anschlußbedingungen an die Gleichungen der beiden benachbarten Gebiete.

#### 4. Eigenschaften der Koeffizienten-Matrix

Die weitere Diskussion wird erleichtert, wenn man die Differenzengleichungen in Form eines linearen Gleichungssystems schreibt. Man numeriert die Maschenpunkte radienweise in positivem Sinne und in der Reihenfolge von innen nach außen (siehe Abb. 3)

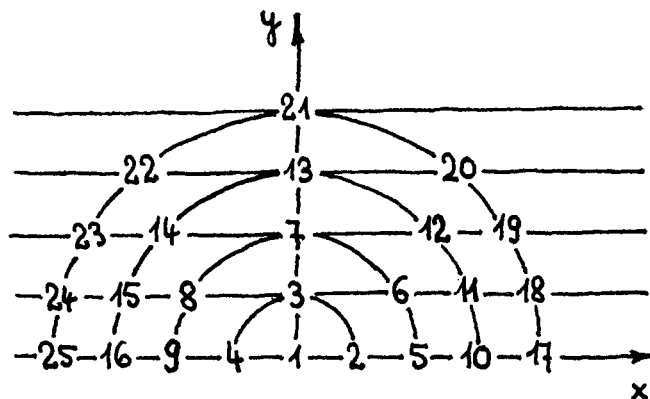


Abb. 3: Numerierung der Gitterpunkte.

Wegen der Stetigkeitsbedingung genügt es, den Gitterpunkten auf der y-Achse lediglich eine Zahl zuzuordnen.

Bei  $I$  Radian sind es  $I^2$  Gitterpunkte, von denen sind  $2I-1$  Randpunkte. Jedem Gitterpunkt wird eine Flußkomponente zugeordnet

$$\vec{\phi} \equiv \begin{bmatrix} \phi_1 \\ \phi_2 \\ | \\ \phi_N \end{bmatrix}$$

Der Flußvektor  $\vec{\phi}$  besteht aus  $N = I^2 G$  Komponenten.

Die Gewichte  $\alpha_{ij}$  für die Berechnung der winkelgemittelten Flüsse sind energieunabhängig. Unter Berücksichtigung der geometrischen Symmetrie erhält man die Gewichtsmatrix  $(\alpha_{\mu\nu})$ . Sie besteht aus  $I$  quadratischen Diagonalmatrizen von der Ordnung  $2i-1$ , die sämtlich den Rang 1 haben;  $(\alpha_{\mu\nu})$  hat daher höchstens den Rang  $I$ .

Schreibt man die Differenzengleichungen (3.13) einschließlich der Randbedingung (3.14) in der Reihenfolge der Numerierung

$$(\alpha_{\mu\nu}) = \begin{bmatrix} 2\alpha_{11} & & & & & & \\ \alpha_{21} 2\alpha_{22} \alpha_{21} & & & & & & \\ \alpha_{21} 2\alpha_{22} \alpha_{21} & & & & & & \\ \alpha_{21} 2\alpha_{22} \alpha_{21} & & & & & & \\ & \alpha_{31} \alpha_{32} 2\alpha_{33} \alpha_{32} \alpha_{31} & & & & & \\ & \alpha_{31} \alpha_{32} 2\alpha_{33} \alpha_{32} \alpha_{31} & & & & & \\ & \alpha_{31} \alpha_{32} 2\alpha_{33} \alpha_{32} \alpha_{31} & & & & & \\ & \alpha_{31} \alpha_{32} 2\alpha_{33} \alpha_{32} \alpha_{31} & & & & & \\ & \alpha_{31} \alpha_{32} 2\alpha_{33} \alpha_{32} \alpha_{31} & & & & & \\ & & & & & & \end{bmatrix}$$

hin, dann erhält man in Matrix-Schreibweise

$$(4.1) \quad A\phi = \frac{1}{\lambda} F\phi$$

Die Matrizen A und F sind quadratisch und von der Ordnung N. Ihre Elemente können folgendermaßen zusammengefaßt werden

$$A \equiv \begin{bmatrix} T_1 - S_1 & -S_{12} & \text{---} & -S_{1G} \\ -S_{21} & T_2 - S_{22} & \text{---} & -S_{2G} \\ | & | & & | \\ -S_{G1} & -S_{G2} & \text{---} & T_G - S_G \end{bmatrix}$$



$$F \equiv \begin{bmatrix} F_{11} & F_{12} & \text{---} & F_{1G} \\ F_{21} & F_{22} & \text{---} & F_{2G} \\ | & | & & | \\ F_{G1} & F_{G2} & \text{---} & F_{GG} \end{bmatrix}$$

Hierin bedeuten

$$T \equiv (T_g) \equiv I - E_g, \quad g \in \{1, \dots, G\}$$

$$S \equiv (S_{gg'}) \equiv \frac{\sigma_{gg'}^s}{\sigma_g^s} [B_g + C_g]$$

$$F \equiv (F_{gg'}) \equiv X \tilde{F} \equiv \chi_g \frac{\nu \sigma_{gg'}^f}{\sigma_g^f} [B_g + C_g]$$

Diese Zusammenfassung entspricht der Multigruppen-Schreibweise der Differenzengleichungen. Die physikalische Bedeutung der Matrizen folgt unmittelbar aus der Gleichung (3.13): Die Matrix  $T$  beschreibt den Neutronen-Transport,  $S$  die Streuung und  $F$  die Spaltung. Die Untermatrizen  $T_g - S_{gg'}$ , sind nur dann von null verschieden, wenn Neutronen von der Energiegruppe  $g'$  in die Energiegruppe  $g$  gestreut werden, bzw. wenn Neutronen in der Energiegruppe  $g'$  Spaltungen verursachen, bei denen Spaltneutronen in der Energiegruppe  $g$  entstehen. Die Struktur der Matrizen  $T_g - S_{gg'}$ , und  $F_{gg'}$ , wird bestimmt von den geometrischen Eigenschaften des Problems. Die Matrizen sind bei Verwendung der Reflexions-Randbedingung von der Ordnung  $I^2$  und bei Verwendung der Vakuum-Randbedingung von der Ordnung  $I(I-1)$ .

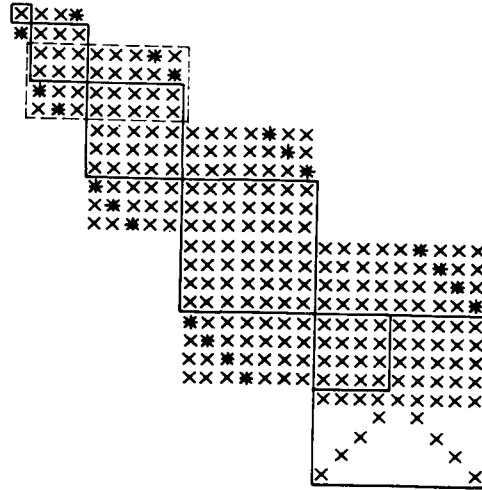


Abb. 4: Struktur der diagonalen Untermatrizen  $A_{gg}$  und  $F_{gg}$  für  $I=5$ .

Abb. 4 zeigt die Struktur der diagonalen Untermatrizen  $A_{gg}$  und  $F_{gg}$ . Kreuze und Sterne bedeuten von null verschiedene Elemente. Sie bilden ein zackenförmiges Band längs der Hauptdiagonalen, das nach unten zu breiter wird. Die eingezeichnete Gruppierung entsteht, wenn man Elemente zusammenfaßt, die zu Maschenpunkten gehören, welche alle auf demselben Halbkreis liegen. Die quadratischen Diagonalmatrizen enthalten die Koeffizienten  $B_{gij}^*$ ; die Elemente außerhalb der Diagonalmatrizen die Koeffizienten  $C_{gij}^*$ ; die Matrizen  $A_{gg}$  enthalten zusätzliche Elemente, die von den Koeffizienten  $E_{gij}$  gebildet werden; sie sind in Abb. 4 durch Sterne gekennzeichnet. Matrixelemente, die solchen Flußkomponenten zuzuordnen sind, die sich auf denselben Gebietsindex  $n_i$  beziehen, bilden einen rechteckigen Block (in Abb. 4 gestrichelt gezeichnet). Die Matrizen  $F_{gg}$  haben nur dann in einer Zeile von null verschiedene Elemente, wenn der zugehörige rechteckige Block in einem Gebiet liegt, das spaltbares Material enthält. Die Matrizen  $A_{gg}$  haben in keiner Zeile ver-

schwindende Elemente, da alle Materialien einen von null verschiedenen Streuquerschnitt haben. Im Falle von Hohlräumen ( $\sigma_{g n_i}^t = 0$ ) sind in den betreffenden Zeilen noch das Diagonalelement und das durch den Stern bezeichnete Element von null verschieden.

Man entnimmt der Abb. 4, daß die Matrizen  $A_{gg}$  quadratisch und irreduzibel sind.

Die Summe  $\Lambda_{g'v}$  der Beträge der in der  $v$ -ten Zeile stehenden Elemente der Matrix  $A_{gg}$ , ist wegen  $\sum_j \alpha_{ij} = \frac{1}{2}$  und  $B_{gij}^* + C_{gij}^* = 1 - E_{gij}$

$$\begin{aligned} \Lambda_{g'v} &= 2 \frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} \left[ B_{gij}^* \sum_j \alpha_{ij} + C_{gij}^* \sum_j \alpha_{i+j} \right] \\ &= \frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} (1 - E_{gij}), \quad g' \neq g \end{aligned}$$

und bei der Matrix  $A_{gg}$  erhält man für die Summe ohne das Diagonalelement

$$\Lambda_{gv} = \frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} (1 - E_{gij}) - \frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} B_{gij}^* \alpha_{ij} + E_{gij}$$

Wegen  $\frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} \leq 1$  und  $E_{gij} \leq 1$  ist

$$(4.2) \quad \Lambda_{gv} \leq 1 - \frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} B_{gij}^* \alpha_{ij}$$

d.i. das Element auf der Hauptdiagonalen. Die Diagonal-Matrizen  $A_{gg}$  sind also diagonal dominant. Summiert man noch über alle Energiegruppen  $g'$ , dann ist wegen

$$\sum_{g'} \frac{\sigma_{gg'n_i}^s}{\sigma_{gn_i}^t} \leq 1$$

$$(4.3) \quad \Lambda_{\nu} \equiv \sum_{g'} \Lambda_{g'\nu} = (1 - E_{gij}) \sum_{g'} \frac{\sigma_{g'g}^s}{\sigma_g^s} - \frac{\sigma_{g'g}^s}{\sigma_g^s} B_{gij} d_{ij} + E_{gij} \\ \leq 1 - \frac{\sigma_{g'g}^s}{\sigma_g^s} B_{gij} d_{ij}$$

also ist auch die Matrix A diagonal dominant. Bei absorbierenden Stoffen ist  $\sum_{g'} \frac{\sigma_{g'g}^s}{\sigma_g^s} < 1$  und wegen  $E_{gij} < 1$  folgt, daß die Matrix A dann strikt diagonal dominant ist.

$\sum_{g'} \frac{\sigma_{g'g}^s}{\sigma_g^s} = 1$  gilt für einen Stoff mit verschwindender Absorption ("idealer Reflektor"), den es nicht gibt. Zumindest würde ein solcher Stoff mit anderen Stoffen verunreinigt sein, so daß  $\sigma^a = 0$  wohl niemals streng erfüllt ist. Immerhin ist der Absorptionsquerschnitt von Graphit und Deuterium sehr klein, und es wäre daher beruhigend zu wissen, welche Konsequenzen für die Matrix A der Fall verschwindender Absorption in einigen Reaktorgebieten hat.

$E_{gij} = 1, B_{gij}^+ = C_{gij}^+ = 0$  gilt für Maschen, die in Reaktor-Hohlräumen ( $\sigma_g^a = 0$ ) liegen, und es folgt ebenfalls lediglich diagonale Dominanz für die entsprechenden Zeilen der Matrix A.

Es ist klar, daß jeder Reaktor wenigstens ein Gebiet mit spaltbarem Material enthält, d.h. es gibt wenigstens ein räumliches Intervall  $(r_i, r_{i+1})$  und eine Energiegruppe  $g'$ , in denen  $\sigma_{g'n_i}^a \neq 0$  und damit  $\sum_{g'} \sigma_{g'g'}^s / \sigma_g^s < 1$  ist. Die Matrix A ist daher mindestens bezüglich eines Blocks (in Abb.4 gestrichelt) strikt diagonal dominant.

Die bisherigen Ergebnisse dieses Abschnitts sollen in folgendem Satz zusammengefaßt werden.

Satz 4.1. a) Die Matrix  $F \equiv (f_{\mu\nu})$  ist nicht negativ; i.e.,  $f_{\mu\nu} \geq 0$  für  $\mu, \nu \in \{1, \dots, N\}$

- b) Die Matrix  $A \equiv (a_{\mu\nu})$  hat positive Diagonalelemente und nicht positive Elemente außerhalb der Diagonale; i.e.,  $a_{\mu\nu} \leq 0$  für  $\mu \neq \nu$  und  $a_{\mu\mu} > 0$  für alle  $\mu, \nu \in \{1, \dots, N\}$
- c) Die Matrix  $A$  ist diagonal-dominant mit strikter Ungleichung für wenigstens eine Zeile. Die diagonalen Untermatrizen  $A_{gg}$  sind quadratisch, irreduzibel und strikt diagonal-dominant.

Unter Verwendung der Eigenschaften b) und c) läßt sich folgender Satz beweisen.

- Satz 4.2
- α) Die diagonalen Untermatrizen haben positive Inverse, i.e.  $A_{gg}^{-1} > 0$ ,  $g \in \{1, \dots, G\}$
  - β) Die Eigenwerte der Matrix  $A$  haben positive Realteile, i.e.  $\operatorname{Re}(\lambda) > 0$
  - γ) Die Matrix  $A$  ist nicht singulär, ihre Inverse ist nicht negativ, i.e.  $A^{-1} \gg 0$

Beweis. Die diagonalen Untermatrizen  $A_{gg}$  erfüllen die Voraussetzungen des Cor. 1. S. 85 in /7/, woraus α) folgt. Aus dem Satz von Gerschgorin folgt, daß die Realteile der Eigenwerte von  $A$  nicht negativ sind; der Fall  $\operatorname{Re}(\lambda) = 0$  läßt sich ausschließen unter Verwendung der Eigenschaften der diagonalen Untermatrizen  $A_{gg}$  /8/ S.75. Teil γ) folgt aus einem Satz nach Fan /9/ S. 229.

Gleichung (4.1) läßt sich also schreiben

$$(4.4) \quad \lambda \phi = A^{-1} F \phi$$

Die Eigenschaften α) - γ) in Satz 1 reichen nicht hin zu zeigen, daß die Matrix  $A^{-1}F$  einen positiven Eigenwert und einen zugehörigen positiven Eigenvektor hat. Wegen  $A^{-1} \gg 0$  ist auch  $A^{-1}F \gg 0$ , und es gilt lediglich /4/

Satz 4.3. Die nicht negative Matrix  $A^{-1}F$  hat einen nicht negativen Eigenvektor und einen zugehörigen nicht negativen Eigenwert, der mindestens so groß ist wie der absolute Betrag jedes anderen Eigenwerts der Matrix  $A^{-1}F$ .

Froehlich /10/ hat zwei ziemlich schwache Bedingungen angegeben, die in allen physikalisch sinnvollen Fällen erfüllt sind, und die zusammen mit den Voraussetzungen a) bis c) für die diskrete Form der Neutronen-Diffusionsgleichung die Existenz einer positiven Lösung garantieren. Wegen ihrer Bedeutung auch für die diskrete Form der Transportgleichung sollen sie im folgenden zitiert werden.

Man betrachte folgende aus den Matrizen A und F gebildete Ketten

$$\begin{aligned}
 & F_{m_1 g}, A_{m_2 m_1}, A_{m_3 m_2}, \dots, A_{g_1 m_d} \\
 & F_{k_1 g_1}, A_{k_2 k_1}, A_{k_3 k_2}, \dots, A_{g_2 k_\beta} \\
 & \vdots \\
 & F_{g_1 g_{L-1}}, A_{g_2 g_1}, A_{g_3 g_2}, \dots, A_{g_L g_{L-1}}; A_{\mu\nu} \neq 0, F_{\mu\nu} \neq 0
 \end{aligned}
 \tag{4.5}$$

Die Länge der Kette (4.5) ist L; die Indizes  $\alpha, \beta, \dots, \omega$  sind nicht negativ; die Kette ist geschlossen, wenn  $g_L = g$  ist. Es wird vorausgesetzt, daß wenigstens eine Kette der Art (4.5) existiert, die mit g beginnt. Dann lauten die beiden Bedingungen

d) Zu jedem  $g' \in \{1, \dots, G\}$  gibt es wenigstens eine Kette, die mit g beginnt und mit  $g_L = g'$  endet.

e) Falls geschlossene Ketten existieren, die mit g beginnen, dann ist eins der größte gemeinsame Teiler der Längen dieser Ketten.



Die Voraussetzungen a) bis e) reichen hin zum Beweis des folgenden Satzes

Satz 4.4. Die Matrizen A und F sollen die Eigenschaften a) bis e) erfüllen. Dann hat die Matrix  $A^{-1}F$  einen eindeutigen positiven Eigenvektor und einen zugehörigen einfachen positiven Eigenwert, der größer ist als der Betrag jedes anderen Eigenwertes.

Beweis. Die Voraussetzungen a) bis e) sind dieselben wie in der Arbeit /10/.

Bezüglich des Ranges der Matrix  $A^{-1}F$  gelten ähnliche Überlegungen wie sie für die entsprechende Matrix des Neutronen-Diffusionsproblems in /11/ angestellt wurden.

Die Matrix  $A^{-1}F$  ist von der Ordnung  $N = I^2G$  und hat daher N Eigenwerte. Der Rang der Matrix  $(\alpha_{\mu\nu})$  und somit der von  $A^{-1}F \equiv A^{-1}(\chi \frac{\sigma_f}{\sigma_t} (\beta\alpha + C\alpha))_{\mu\nu}$  beträgt jedoch nur I. Also hat die Matrix  $A^{-1}F$  nur I von Null verschiedene Eigenwerte. Es liegt daher nahe, statt der Eigenwertgleichung (4.4) eine andere zu lösen, deren Ordnung von der Größe I ist. Um sie zu finden, führt man einen neuen Vektor  $\Psi$ , die Spaltquelle, ein. Er ist von der Ordnung I und wird definiert durch

$$(4.6) \quad \Psi_g \equiv \frac{1}{\lambda} \sum_{g'} \frac{\nu \sigma_{g'g}^f}{\sigma_{g'g}^t} \phi_{g'} = \frac{1}{\lambda} \tilde{F} \phi$$

Aus der Eigenwertgleichung

$$A \phi = \frac{1}{\lambda} X \tilde{F} \phi$$

wird

$$(4.7) \quad \begin{aligned} A \phi &= X \Psi \\ \phi &= A^{-1} X \Psi \end{aligned}$$

und nach Multiplikation mit  $\frac{1}{\lambda} \tilde{F}$  von links

$$\frac{1}{\lambda} \tilde{F} \phi = \psi = \frac{1}{\lambda} \tilde{F} A^{-1} X \psi$$

oder

$$(4.8) \quad \lambda \psi = T \psi, \quad T \equiv \tilde{F} A^{-1} X$$

Die Spaltquelle genügt der neuen Eigenwertgleichung (4.8). Falls  $\phi$  ein Eigenvektor der Matrix  $A^{-1} \tilde{F}$  ist und  $\lambda \neq 0$  der zugehörigen Eigenwert, dann ist die Spaltquelle  $\psi$ , die man mittels (4.6) aus  $\phi$  erhält, Eigenvektor der Matrix  $\tilde{F} A^{-1}$  und  $\lambda$  der zugehörige Eigenwert. Und ist umgekehrt  $\psi$  ein Eigenvektor der Matrix  $\tilde{F} A^{-1}$  und  $\lambda \neq 0$  der zugehörige Eigenwert, dann ist der Fluß  $\phi$ , den man mittels (4.7) aus  $\psi$  erhält, Eigenvektor der Matrix  $A^{-1} \tilde{F}$  und  $\lambda$  der zugehörige Eigenwert.

Wegen  $A(A^{-1} \tilde{F})A^{-1} = AA^{-1}(\tilde{F}A^{-1}) = \tilde{F}A^{-1}$  sind die beiden Matrizen  $A^{-1} \tilde{F}$  und  $\tilde{F}A^{-1}$  ähnlich. Sie haben daher dieselben von null verschiedenen Eigenwerte. Statt des Fluß-Eigenwertproblems (4.4) kann man also auch das Quell-Eigenwertproblem (4.8) zu lösen versuchen.

## 5. Lösung des partiellen Eigenwertproblems

Die vollständige Lösung der Eigenwertgleichung (4.8) wäre ein aufwendiges Problem. In der Reaktorphysik betrachtet man jedoch häufig Anordnungen, die nach einer anfänglichen Störung sich selbst überlassen bleiben. In der Regel beobachtet man das asymptotische Verhalten, das sich nach einer hinreichend großen Zahl von Neutronen-Generationen einstellt. Es wird, wie Birkhoff

und Varga /4/ gezeigt haben, durch den dominanten Eigenvektor des Eigenwertproblems (4.8) beschrieben; man versteht darunter denjenigen Eigenvektor, der zum betragsgrößten Eigenwert gehört.

Die Berechnung des dominanten Eigenvektors und des zugehörigen Eigenwerts des Problems (4.8) ist sehr viel weniger aufwendig. Wegen der hohen Ordnung der Matrizen wäre der direkte Weg, der in der Berechnung der Nullstellen des charakteristischen Polynoms besteht, unpraktisch. Vielmehr bietet sich das Iterationsverfahren nach von Mises an.

### 5.1 Äußere Iterationen

Satz 5.1. Die  $N \times N$  Matrix  $T$  habe  $N$  linear unabhängige Eigenvektoren. Die zugehörigen Eigenwerte seien dem Betrage nach angeordnet

$$|\lambda_1| < |\lambda_2| \leq |\lambda_3| \leq \dots \leq |\lambda_N|.$$

Für eine nicht negative Schätzung  $\psi(0)$  konvergiert das Iterationsverfahren

$$\begin{aligned} S(\ell) &= T\psi(\ell-1), \quad \ell = 1, 2, \dots \\ (5.1) \quad \lambda(\ell) &= \|S(\ell)\| \\ \psi(\ell) &= \frac{S(\ell)}{\|S(\ell)\|} \end{aligned}$$

Die Konvergenz erfolgt gemäß der Formel

$$\lambda(\ell) = \lambda_1 + O\left(\left|\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right|^\ell\right)$$

Beweis. Nach Satz 4.4. und den Bemerkungen im Anschluß daran über den Rang der Matrix  $T$  sind die Voraussetzungen dieses Satzes erfüllt. Eine genauere Formulierung und den Beweis findet man in /14/.

Aus praktischen Gründen wurden in Theorem 5.1 die Vektoren auf eins normiert.

Von besonderer praktischer Bedeutung sind obere und untere Schranken für den dominanten Eigenwert  $\lambda_1$ . Sie können dem folgenden Satz entnommen werden /7/ S. 47.

Satz 5.2. Es sei  $T$  eine nicht negative  $N \times N$  Matrix mit der Eigenschaft, daß für einen positiven Vektor  $\Psi > 0$  ebenfalls  $T\Psi > 0$  folgt. Ferner sei

$$\Psi(\ell) = T\Psi(\ell-1) = T^2\Psi(\ell-2) = \dots = T^\ell\Psi(0), \quad \ell=1,2,\dots, \quad \Psi(0) > 0$$

und

$$\underline{\lambda}(\ell) \equiv \min_{1 \leq v \leq N} \frac{\Psi_v(\ell+1)}{\Psi_v(\ell)}, \quad \overline{\lambda}(\ell) \equiv \max_{1 \leq v \leq N} \frac{\Psi_v(\ell+1)}{\Psi_v(\ell)},$$

dann ist

$$\underline{\lambda}(0) \leq \underline{\lambda}(1) \leq \dots \leq \rho(T) \leq \dots \leq \overline{\lambda}(1) \leq \overline{\lambda}(0).$$

Beweis. Die Voraussetzung  $T\Psi > 0$  für alle  $\Psi > 0$  folgt aus der Bedingung d) in Abschnitt 4.

Obere und untere Schranken  $\overline{\lambda}(\ell)$  und  $\underline{\lambda}(\ell)$  können dazu benutzt werden, den Fehler  $\varepsilon$  abzuschätzen, den man macht, wenn man das Iterationsverfahren nach dem  $\ell$ -ten Schritt abbricht. Eine sinnvolle Beziehung ist

$$\frac{\overline{\lambda}(\ell) - \underline{\lambda}(\ell)}{\underline{\lambda}(\ell)} \leq \varepsilon.$$

## 5.2 Innere Iterationen

Die Anwendung des Quell-Iterationsverfahrens (5.1) setzt voraus, daß man das Produkt  $T\Psi(\ell-1)$  berechnen oder zumindest approximieren kann. Eine direkte Berechnung ist nicht möglich, da den auftretenden Matrizen wegen ihrer hohen Ordnung aus Gründen der

Kapazität keine Speicherplätze zugewiesen werden können. Auch sollten Matrix-Operationen wegen der langen Rechenzeiten nach Möglichkeit vermieden werden. Die Behandlung des Eigenwertproblems (4.8) an Stelle von (4.4) bietet erstens den Vorteil, daß von einem Iterationsschritt zum nächsten der kürzere Vektor  $\Psi$  statt des längeren  $\phi$  gespeichert zu werden braucht. Zweitens kann man das Produkt  $T\Psi(\ell-1)$  folgendermaßen approximieren:

Wegen (4.8) und (4.7) ist

$$(5.2) \quad T\Psi(\ell-1) \equiv \tilde{F}A^{-1}X\Psi(\ell-1) = \tilde{F}\phi(\ell)$$

Das Produkt  $F\phi(\ell)$  läßt sich leicht bilden. Man kann also  $T\Psi(\ell-1)$  berechnen, wenn man  $\phi(\ell)$  kennt. Berechnung von  $\phi(\ell)$  bedeutet Lösung des linearen Gleichungssystems

$$(5.3) \quad A\phi(\ell) = X\Psi(\ell-1)$$

wobei im  $\ell$ -ten Iterationsschritt  $X\Psi(\ell-1)$  bekannt ist. Wegen der Größe der Matrix  $A$  löst man das Quellproblem (5.3) ebenfalls iterativ. Zur Unterscheidung nennt man die Iterationen zur Lösung von (5.3) innere Iterationen und die zur Berechnung des größten Eigenwertes in (5.1) äußere Iterationen.

Gelegentlich hat man es mit Anordnungen zu tun, bei denen man nur Abwärtsstreuung zu berücksichtigen braucht. Gl.(4.1) vereinfacht sich dann zu

$$(5.4) \quad T_g\phi_g(\ell) = \sum_{g' < g} S_{gg'}\phi_{g'}(\ell) + \chi_g\Psi(\ell-1), \quad g \in \{1, \dots, G\}$$

In diesem Fall ist die Matrix  $S_{gg}$ , eine Dreiecksmatrix; bei der Lösung beginnt man in der Gruppe der höchsten Energie ( $g=1$ ) und rechnet sukzessive bis zur niedrigsten Energiegruppe ( $g=G$ ), wobei man jedesmal die Ergebnisse der Rechnungen in den vorherigen Gruppen mitverwendet. In jeder Gruppe hat man dann nur noch ein Gleichungssystem von der Ordnung  $I^2$  zu lösen.

Im allgemeinen Fall hat man Auf- und Abwärtsstreuung von Neutronen zu berücksichtigen. Die Matrix  $S_{gg'}$ , hat dann nicht mehr Dreiecksgestalt, und der Rechenaufwand ist beträchtlich größer. Man kann zur Lösung folgendes Iterationsverfahren verwenden:

Satz 5.3. Das Iterationsverfahren

$$(5.5) \quad T_g \phi_g(m+1) = \sum_{g' \leq g} S_{gg'} \phi_{g'}(m+1) + \sum_{g' > g} S_{gg'} \phi_{g'}(m) + \chi_g \psi, \quad m = 0, 1, \dots$$

ist konvergent.  $m$  ist der Index der "thermischen" Iterationen.

Beweis. Nach den Ergebnissen des Abschnitts 4 ist die Matrix  $A$  reell und quadratisch, und ihre Elemente außerhalb der Diagonale sind nicht positiv; ferner ist  $A^{-1} \succ 0$ . Definitionsgemäß ist  $A$  eine M-Matrix. Man betrachte eine Zerlegung  $A = M - N$  von  $A$ , bei der die Matrix  $M$  dadurch gebildet wird, daß in  $A$  die Aufwärtsstreuung gleich null gesetzt wird. Dann ist nach [7] S. 90 diese Zerlegung regulär und konvergent.

In vielen Fällen erstreckt sich die Aufwärtsstreuung nur über einige Energiegruppen, die "thermischen" Gruppen; in den übrigen Energiegruppen gibt es nur Abwärtsstreuung. Man faßt dann die "thermischen" Gruppen zu einer einzigen Gruppe zusammen, löst zunächst die Gleichung (5.4) und wendet anschließend zur Berechnung der Flüsse im thermischen Energiebereich das Iterationsverfahren (5.5) an.

Punkt-Iterationsverfahren

Die Anwendung der Verfahren (5.4) und (5.5) setzt voraus, daß man das Gleichungssystem

$$(5.6) \quad A_{gg} \phi_g \equiv (T_g - S_{gg}) \phi_g = k$$

$$k \equiv \sum_{g'} S_{gg'} \phi_{g'} + \chi_g \psi$$

lösen kann; hierbei wird der Vektor  $\mathbf{k}$  als bekannt vorausgesetzt. Die Matrix  $A_{gg}$  ist von der Ordnung  $I^2$ , und es liegt daher nahe, auch dieses Gleichungssystem iterativ zu lösen. Die folgenden Überlegungen beziehen sich durchweg auf die  $g$ -te Energiegruppe. Der Index  $g$  wird daher weggelassen. Ein sehr einfaches Iterationsverfahren zur Lösung des Gleichungssystems (5.6) beruht auf der Zerlegung  $A = M_p - N_p$  mit  $M_p \equiv I - E$  und  $N_p \equiv s(B+C)$ ,  $s \equiv \sigma^s / \sigma^t$ . Es lautet

$$(5.7) \quad \phi_{ij}^-(n+1) = E_{ij} \phi_{i+1,j}^-(n+1) + s_{n_i} [B_{ij}^- \phi_i(n) + C_{ij}^- \phi_{i+1}(n)] + \frac{1}{\sigma_{n_i}^t} [B_{ij}^- \tilde{Q}_i + C_{ij}^- \tilde{Q}_{i+1}]$$

$$\phi_{ij}^+(n+1) = E_{i-1,j} \phi_{i-1,j}^+(n+1) + s_{n_{i-1}} [B_{i-1,j}^+ \phi_i(n) + C_{i-1,j}^+ \phi_{i-1}(n)] + \frac{1}{\sigma_{n_{i-1}}^t} [B_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_i + C_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_{i-1}], \quad n=0,1,\dots$$

worin  $n$  der Iterationsindex ist. Man rechnet also in jeder Iteration maschenpunkt-weise für  $x_{ij} < 0$  von außen nach innen und für  $x_{ij} > 0$  von innen nach außen. Bei vorgegebener Vakuum-Randbedingung ist es zweckmäßig, mit der Berechnung am Rand zu beginnen. Nach einem Durchgang durch sämtliche Maschenpunkte werden die mittleren Flüsse  $\phi_i$  neu berechnet.

Satz 5.4. Das Iterationsverfahren (5.7) ist konvergent.

Beweis. Wegen  $M_p^{-1} = (I - E)^{-1} = I + E + E^2 + \dots \geq 0$  und  $N_p = s(B+C) \geq 0$  ist die Zerlegung  $A = M_p - N_p$  regulär, und wegen  $A^{-1} \geq 0$  ist sie auch konvergent // S. 89.

Der Rechenaufwand bei diesem Iterationsverfahren läßt sich leicht abschätzen. Pro Iteration und Energiegruppe benötigt man für eine homogene Anordnung zur Berechnung

$$\begin{aligned} \text{der } \phi^- \text{ und } \phi^+ \text{ in (5.7)} & \quad 4 \left( \sum_{i=1}^{i-1} i + \sum_{i=2}^1 (i-1) \right) \\ \text{der mittleren Flüsse nach (3.19)} & \quad \sum_{i=1}^1 i \end{aligned}$$



und der Streurrate  $I$  Punktoperationen, insgesamt also  $\frac{9}{2}|^2 - \frac{5}{2}| = \frac{9}{2}|^2 + O(I)$ , da für große  $I$  der quadratische Summand überwiegt. Man könnte daran denken, statt des Iterationsverfahrens (5.7) die etwas besser konvergierenden Verfahren nach Jacobi oder Gauß-Seidel zu verwenden. Man hätte dazu die  $\phi_i$  in (5.7) in jedem Maschenpunkt neu zu berechnen. Der erwartete Zeitgewinn würde jedoch wegen des höheren Rechenaufwands zumindest teilweise wieder aufgezehrt werden. Daher sollen diese beiden Verfahren nicht näher betrachtet werden.

#### Block-Iterationsverfahren

Ein anderes mögliches Iterationsverfahren zur Lösung des Gleichungssystems (5.6) beruht auf der Zerlegung  $A = M_B - N_B$  mit  $M_B \equiv I - s(B+C)$  und  $N_B \equiv E$ , oder ausgeschrieben

$$\begin{aligned}
 (5.8) \quad \phi_{ij}^-(n+1) &= E_{ij} \phi_{i+1,j}^-(n) + s_{n_i} [B_{ij}^- \phi_i(n+1) + C_{ij}^- \phi_{i+1}(n+1)] \\
 &\quad + \frac{1}{\sigma_{n_i}} [B_{ij}^- \tilde{Q}_i + C_{ij}^- \tilde{Q}_{i+1}] \\
 \phi_{ij}^+(n+1) &= E_{i-1,j} \phi_{i-1,j}^+(n) + s_{n_{i-1}} [B_{i-1,j}^+ \phi_i(n+1) + C_{i-1,j}^+ \phi_{i-1}(n+1)] \\
 &\quad + \frac{1}{\sigma_{n_{i-1}}} [B_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_i + C_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_{i-1}], \quad n=0,1,\dots
 \end{aligned}$$

Satz 5.5. Das Iterationsverfahren (5.8) ist konvergent.

Beweis. Wegen  $M_B^{-1} = [I - s(B+C)]^{-1} = I + s(B+C) + s^2(B+C)^2 + \dots \gg 0$  und  $N_B \equiv E \gg 0$  ist die Zerlegung  $A = M_B - N_B$  regulär und wegen  $A^{-1} \gg 0$  ist sie auch konvergent.

Im folgenden soll gezeigt werden, daß sich die Matrix  $M_B$  ohne größeren numerischen Aufwand invertieren läßt. Die Differenzengleichungen (3.13) können in folgender Form geschrieben werden

$$\begin{aligned}\bar{\phi}_{ij} - s_{n_i} [B_{ij}^- \phi_i + C_{ij}^- \phi_{i+1}] &= p_{ij}, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}, \quad j \in \{1, \dots, i\} \\ p_{ij} &\equiv E_{ij} \bar{\phi}_{i+1,j} + \frac{1}{\sigma_{n_i}^2} [B_{ij}^- \tilde{Q}_i + C_{ij}^- \tilde{Q}_{i+1}] \\ \tilde{Q}_i &= \sum_{g \neq i} \sigma_{qg}^s \phi_{g,i} + \frac{1}{\lambda} \sum_{g^1} \sigma_{g^1}^f \phi_{g^1,i}, \quad s_{q n_i} \equiv \frac{\sigma_{q n_i}^s}{\sigma_{q n_i}^f}\end{aligned}$$

und

$$\begin{aligned}\phi_{ij}^+ - s_{n_{i-1}} [B_{i-1,j}^+ \phi_i + C_{i-1,j}^+ \phi_{i-1}] &= q_{ij}, \quad i \in \{2, \dots, l\}, \quad j \in \{1, \dots, i-1\} \\ q_{ij} &\equiv E_{i-1,j} \phi_{i-1,j}^+ + \frac{1}{\sigma_{n_{i-1}}^2} [B_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_i + C_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_{i-1}]\end{aligned}$$

Zu diesen Gleichungen kommen noch die Stetigkeitsbedingungen für Punkt auf der y-Achse

$$\phi_{ii}^+ = \bar{\phi}_{ii}, \quad i \in \{1, \dots, l\}$$

Insbesondere ist

$$\bar{\phi}_{ii} - s_{n_i} [B_{ii}^- \phi_i + C_{ii}^- \phi_{i+1}] = p_{ii}$$

Setzt man

$$\begin{aligned}q_{ii} &\equiv p_{ii} \\ B_{i-1,i}^+ &\equiv B_{ii}^- \\ C_{i-1,i}^+ &\equiv C_{ii}^- \\ s_{n_{i-1}}^{(i)} &\equiv \begin{cases} s_{n_{i-1}}, & j \in \{1, \dots, i-1\} \\ s_{n_i}, & j=i \end{cases}\end{aligned}$$

dann kann man zusammenfassend schreiben

$$\begin{aligned}(59) \quad \bar{\phi}_{ij} - s_{n_i} [B_{ij}^- \phi_i + C_{ij}^- \phi_{i+1}] &= p_{ij} \\ \phi_{ij}^+ - s_{n_{i-1}} [B_{i-1,j}^+ \phi_i + C_{i-1,j}^+ \phi_{i-1}] &= q_{ij}\end{aligned} \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

Nach Multiplikation mit  $\alpha_{ij}$  und Addition erhält man

$$\begin{aligned}\sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (\bar{\phi}_{ij} + \phi_{ij}^+) &\equiv \phi_i = \phi_i \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (s_{n_i} B_{ij}^- + s_{n_{i-1}}^{(i)} B_{i-1,j}^+) + \\ &+ \phi_{i+1} \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} s_{n_i} C_{ij}^- + \phi_{i-1} \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} s_{n_{i-1}}^{(i)} C_{i-1,j}^+ + \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (p_{ij} + q_{ij})\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}
 & -\phi_{i-1} s_{n_{i-1}} \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} C_{i-1j}^+ + \phi_i [1 - s_{n_i} \langle \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} B_{ij}^- + \alpha_{ii} B_{ii}^- \rangle - s_{n_{i-1}} \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} B_{ij}^+ ] - \\
 & -\phi_{i+1} s_{n_i} \langle \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} C_{ij}^- + \alpha_{ii} C_{ii}^- \rangle = \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} p_{ij} + \alpha_{ii} p_{ii} + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} q_{ij}
 \end{aligned}$$

Im Mittelpunkt  $r=0$  ( $i=1$ ) ist einfach

$$\phi_{11}^- - s_{n_1} [B_{11}^- \phi_1 + C_{11}^- \phi_2] = p_{11}$$

und wegen  $\phi_{11}^- = \phi_{11}^+ = \phi_1$  ist

$$\phi_1 [1 - s_{n_1} B_{11}^-] - s_{n_1} C_{11}^- \phi_2 = p_{11}$$

Am Rand  $r = R(i=I)$  gilt

$$\begin{aligned}
 \phi_{Ij}^+ - s_{n_{I-1}} [B_{I-1j}^+ \phi_1 + C_{I-1j}^+ \phi_{I-1}] &= q_{Ij}, \quad j \in \{1, \dots, I-1\} \\
 \phi_{I1}^+ - s_{n_{I-1}} \phi_1 &= q_{I1}, \quad q_{I1} = \frac{1}{\sigma_{n_{I-1}}^t} \tilde{Q}_1
 \end{aligned}$$

Vakuum-Randbedingung:

$$\begin{aligned}
 \phi_{Ij}^- &= 0, \quad j \in \{1, \dots, I\} \\
 \sum_{j=1}^I \alpha_{Ij} \phi_{Ij}^+ &= \phi_I = s_{n_{I-1}} \phi_1 \langle \sum_{j=1}^{I-1} \alpha_{Ij} B_{I-1j}^+ + \alpha_{II} \rangle + s_{n_{I-1}} \phi_{I-1} \sum_{j=1}^{I-1} \alpha_{Ij} C_{I-1j}^+ + \sum_{j=1}^I \alpha_{Ij} q_{Ij}
 \end{aligned}$$

Reflexionsrandbedingung:

$$\begin{aligned}
 \phi_{Ij}^- &= \phi_{Ij}^+, \quad j \in \{1, \dots, I\} \\
 \sum_{j=1}^I \alpha_{Ij} \phi_{Ij}^+ &= \frac{1}{2} \phi_I
 \end{aligned}$$

oder nach Umordnung

$$-\phi_{I-1} s_{n_{I-1}} \sum_{j=1}^{I-1} \alpha_{Ij} C_{I-1j}^+ + \phi_I [\gamma - s_{n_{I-1}} \langle \sum_{j=1}^{I-1} \alpha_{Ij} B_{I-1j}^+ + \alpha_{II} \rangle] = \sum_{j=1}^I \alpha_{Ij} q_{Ij}$$

$$\gamma = \begin{cases} 1: & \text{Vakuum-Randbedingung} \\ \frac{1}{2}: & \text{Reflexionsbedingung} \end{cases}$$

Setzt man

$$a_i \equiv s_{n_i} \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} C_{i-1j}^+, \quad i \in \{2, \dots, l\}$$

$$b_i \equiv 1 - s_{n_i} \left\langle \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} B_{ij}^- + \alpha_{ii} B_{ii}^- \right\rangle - s_{n_{i-1}} \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} B_{i-1j}^+, \quad i \in \{2, \dots, l-1\}$$

$$b_1 \equiv 1 - s_{n_1} B_{11}^-, \quad b_l \equiv 1 - s_{n_{l-1}} \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{lj} B_{l-1j}^+$$

$$c_i \equiv s_{n_i} \left\langle \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} C_{ij}^- + \alpha_{ii} C_{ii}^- \right\rangle, \quad i \in \{2, \dots, l-1\}$$

$$c_1 \equiv s_{n_1} C_{11}^-$$

und

$$k_i \equiv \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} p_{ij} + \alpha_{ii} p_{ii} + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} q_{ij}, \quad i \in \{2, \dots, l-1\}$$

$$k_1 \equiv p_{11}$$

$$k_l \equiv \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{lj} q_{lj}$$

dann erhält man folgendes Gleichungssystem von der Ordnung I

$$\begin{array}{rcl}
 b_1 \phi_1 - c_1 \phi_2 & & = k_1 \\
 -a_2 \phi_1 + b_2 \phi_2 - c_2 \phi_3 & & = k_2 \\
 -a_3 \phi_2 + b_3 \phi_3 - c_3 \phi_4 & & = k_3 \\
 & & \vdots \\
 & & -c_{l-1} \phi_l \\
 & -a_l \phi_{l-1} + b_l \phi_l & = k_{l-1} \\
 & & = k_l
 \end{array}
 \quad (5.10)$$

das sich leicht durch Elimination lösen läßt.

Elimination der Elemente unterhalb der Diagonale (Vorwärts-Elimination) ergibt

$$\begin{aligned}
 \phi_1 - w_1 \phi_2 &= g_1, \quad w_1 = \frac{c_1}{b_1}, \quad g_1 = \frac{k_1}{b_1} \\
 -a_2(g_1 + w_1 \phi_2) + b_2 \phi_2 - c_2 \phi_3 &= k_2 \\
 (b_2 - a_2 w_1) \phi_2 - c_2 \phi_3 &= k_2 + a_2 g_1 \\
 \phi_2 - w_2 \phi_3 &= g_2, \quad w_2 = \frac{c_2}{b_2 - a_2 w_1}, \quad g_2 = \frac{k_2 + a_2 g_1}{b_2 - a_2 w_1} \\
 &\vdots \\
 \phi_{i-1} - w_{i-1} \phi_i &= g_{i-1}, \quad w_{i-1} = \frac{c_{i-1}}{b_{i-1} - a_{i-1} w_{i-2}}, \quad g_{i-1} = \frac{k_{i-1} + a_{i-1} g_{i-2}}{b_{i-1} - a_{i-1} w_{i-2}} \\
 -a_i(g_{i-1} + w_{i-1} \phi_i) + b_i \phi_i &= k_i \\
 (b_i - a_i w_{i-1}) \phi_i &= k_i + a_i g_{i-1} \\
 \phi_i = g_i, \quad g_i &= \frac{k_i + a_i g_{i-1}}{b_i - a_i w_{i-1}}
 \end{aligned}$$

Durch Rückwärts-Substitution gelangt man zu folgender Rekursionsformel

$$\begin{aligned}
 w_i &= \frac{c_i}{b_i}, \quad w_i = \frac{c_i}{b_i - a_i w_{i-1}}, \quad i \in \{2, \dots, l-1\} \\
 g_i &= \frac{k_i}{b_i}, \quad g_i = \frac{k_i + a_i g_{i-1}}{b_i - a_i w_{i-1}}, \quad i \in \{2, \dots, l\} \\
 (5.11) \quad \phi_l &= g_l, \quad \phi_i = g_i + w_i \phi_{i-1}, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}
 \end{aligned}$$

Die Winkelflüsse  $\phi_{ij}^-$  und  $\phi_{ij}^+$  ergeben sich durch Einsetzen der  $\phi_i$  in (5.9). Bei diesem Verfahren wird fast der ganze Block der Matrix-Elemente in Abb. 4 gleichzeitig invertiert. Lediglich jeweils einer der beiden Summanden, die die gesterntten Elemente bilden, ist nicht davon betroffen.

Die folgende Bemerkung betrifft die Rundungsfehler beim Gauß'schen Eliminationsverfahren, die in der Praxis stets auftreten.

Wegen  $0 \leq C_{ij} \leq 1$ ,  $\sum_{j=1}^i \alpha_{ij} = \frac{1}{2}$ ,  $\alpha_{ij} > 0$  und  $0 \leq S_{n_i} \leq 1$  ist  $0 < a_i < 1$  und  $0 < c_i < 1$ ,  $i \in \{1, \dots, l\}$ . Ferner ist

$$\begin{aligned} b_i - a_i - c_i &= 1 - S_{n_{i-1}} \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} (1 - E_{i-1,j}) - S_{n_i} \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (1 - E_{ij}) - S_{n_i} \alpha_{ii} (1 - E_{ii}) \\ &= 1 - \frac{1}{2} S_{n_{i-1}} + S_{n_{i-1}} \alpha_{ii} - \frac{1}{2} S_{n_i} - S_{n_i} \alpha_{ii} + S_{n_{i-1}} \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} E_{i-1,j} + S_{n_i} \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} E_{ij} + S_{n_i} \alpha_{ii} E_{ii} > 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{wegen } 1 - \frac{1}{2} S_{n_{i-1}} + S_{n_{i-1}} \alpha_{ii} - \frac{1}{2} S_{n_i} - S_{n_i} \alpha_{ii} &= 1 - S_{n_{i-1}} \left( \frac{1}{2} - \alpha_{ii} \right) - S_{n_i} \left( \frac{1}{2} + \alpha_{ii} \right) \\ &\geq 1 - \left( \frac{1}{2} - \alpha_{ii} \right) - \left( \frac{1}{2} + \alpha_{ii} \right) = 0, \end{aligned}$$

$$b_1 - c_1 = 1 - S_{n_1} (1 - E_{11}) \geq S_{n_1} E_{11} > 0,$$

$$\begin{aligned} b_1 - a_1 &= 1 - S_{n_{l-1}} \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{1j} (1 - E_{l-1,j}) = 1 - \frac{1}{2} S_{n_{l-1}} + S_{n_{l-1}} \alpha_{ll} + S_{n_{l-1}} \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{1j} E_{l-1,j} \\ &\geq \frac{1}{2} + S_{n_{l-1}} \alpha_{ll} + S_{n_{l-1}} \sum_{j=1}^{l-1} \alpha_{1j} E_{l-1,j} > 0. \end{aligned}$$

Damit ist auch  $0 < b_i < 1$ ,  $i \in \{1, \dots, l\}$ . Nach (5.11) gilt für ein  $w_{i-1} < 1$

$$0 < w_i \leq \frac{c_i}{b_i - a_i} < \frac{c_i}{c_i} = 1.$$

Da  $w_1 = \frac{c_1}{b_1} < 1$  ist, liegen alle  $w_i$  zwischen null und eins. Die Rundungsfehler sind daher abschätzbar /15/. Eine Pivotsuche ist nicht erforderlich.

Der Rechenaufwand für eine homogene Anordnung kann wie folgt abgeschätzt werden:

Sieht man vom Aufwand zur Berechnung der Größen  $a_i$ ,  $b_i$ ,  $c_i$  und  $w_i$  ab, die sich während der Iteration nicht ändern und daher nur einmal berechnet zu werden brauchen, dann benötigt man pro Iteration und Energiegruppe zur Berechnung der

$$g_i : 3(1-1) + 1$$

$$\phi_i : 1-1$$

$$\phi_{ij} : 4(1-1) + 1$$

und  $k_i : 1(1-1) + 6(1-1)$  Punktoperationen, insgesamt also  $51^2 + 61 - 9 = 51^2 + O(1)$  Punktoperationen. Das ist etwas mehr als man zur Ausführung des Punkt-Iterationsverfahrens (5.7) benötigt.

#### ADI-Verfahren

Es liegt nahe, das Block-Iterationsverfahren (5.8) dadurch zu beschleunigen, daß man bei der Berechnung der Winkelflüsse  $\phi_{ij}$  aus (5.9) die zuvor erhaltenen Winkelflüsse bereits mitverwendet. Offensichtlich bedeutet diese Vorschrift eine Kombination der beiden Iterationsverfahren (5.7) und (5.8), die den gleichen numerischen Aufwand wie das Verfahren (5.8) erfordert, in Matrix-Schreibweise

$$(5.12) \quad \begin{aligned} [I - s(B+C)] \phi^{(n+\frac{1}{2})} &= E \phi^{(n)} + k \\ (I - E) \phi^{(n+1)} &= s(B+C) \phi^{(n+\frac{1}{2})} + k, \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Beachtet man, daß die Matrix E auf den Index i und die Matrizen B und C auf den Index j wirken, dann kann man das folgende Iterationsverfahren als ein ADI-Verfahren ansehen, das demjenigen von Peaceman und Rachford /12/ ähnlich ist,

$$(5.13) \quad \begin{aligned} [\omega I + E] \phi^{(n+\frac{1}{2})} &= [\omega I + s(B+C)] \phi^{(n)} + k \\ [\omega I - E] \phi^{(n+1)} &= [\omega I + s(B+C)] \phi^{(n+\frac{1}{2})} + k, \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned}$$

Offensichtlich ist die Kombination (5.12) gleich dem ADI-Verfahren (5.13) für  $\omega = 0$ . Die Iterationsmatrix  $T_\omega$  erhält man durch Elimination von  $\phi^{(n+\frac{1}{2})}$

$$[(\omega+1)I-E]\phi^{(n+1)} = [\omega I + s(B+C)][(\omega+1)I - s(B+C)]^{-1}\{(\omega I - E)\phi^{(n)} + h\} + h$$

oder

$$\begin{aligned}\phi^{(n+1)} &= T_\omega \phi^{(n)} + u_j \\ T_\omega &\equiv [(\omega+1)I-E]^{-1}[\omega I + s(B+C)][(\omega+1)I - s(B+C)]^{-1}(\omega I + E) \\ u_j &\equiv [(\omega+1)I-E]^{-1}\{[\omega I + s(B+C)][(\omega+1)I - s(B+C)]^{-1} + I\}h\end{aligned}$$

Satz 5.6. Das Iterationsverfahren (5.12) ist konvergent für  $\omega \gg 0$ .

Beweis. Die Iterationsmatrix  $T_\omega$  läßt sich schreiben

$$\begin{aligned}T_\omega &= \{I - [(\omega+1)I-E]^{-1}[I-E-s(B+C)]\} \cdot \{I - [(\omega+1)I-s(B+C)]^{-1}[I-E-s(B+C)]\} \\ &= \{I - M_1^{-1}A\} \{I - M_2^{-1}A\}\end{aligned}$$

worin  $M_1 \equiv (\omega+1)I - E$

$$M_2 \equiv (\omega+1)I - s(B+C)$$

$$A \equiv I - E - s(B+C) \quad \text{bedeuten.}$$

Daher ist

$$\begin{aligned}T_\omega &= I - M_2^{-1}A - M_1^{-1}A + M_2^{-1}A M_1^{-1}A \\ &= I - [M_2^{-1} + M_1^{-1} - M_2^{-1}A M_1^{-1}]A \\ &= I - M_2^{-1}[M_1 + M_2 - A]M_1^{-1}A\end{aligned}$$

oder

$$\begin{aligned}T_\omega &= I - (2\omega+1)\langle(\omega+1)I - s(B+C)\rangle^{-1}\langle(\omega+1)I - E\rangle^{-1}\langle I - E - s(B+C)\rangle \\ &\equiv I - M^{-1}A = M^{-1}[M - A] = M^{-1}N\end{aligned}$$

mit  $M = \frac{1}{2\omega+1}[(\omega+1)I - E][(\omega+1)I - s(B+C)]$



Es sei

$$\begin{aligned} N &\equiv M - A = \frac{1}{2\omega+1} \langle (\omega+1)I - E \rangle \langle (\omega+1)I - s(B+C) \rangle - \langle I - E - s(B+C) \rangle \\ &= \frac{1}{2\omega+1} \left[ (\omega+1)^2 I - (\omega+1) \langle E + s(B+C) \rangle + sE(B+C) \right] - I + E + s(B+C) \\ &= \frac{1}{2\omega+1} \left[ \omega^2 I + \omega \langle E + s(B+C) \rangle + sE(B+C) \right] \gg 0, \quad \omega \gg 0 \end{aligned}$$

Wegen  $(I-E)^{-1} \gg 0$  und  $\langle I - s(B+C) \rangle^{-1} \gg 0$  sind auch  $\langle (\omega+1)I - E \rangle^{-1} \gg 0$  und  $\langle (\omega+1)I - s(B+C) \rangle^{-1} \gg 0$  für  $\omega \gg 0$  und somit

$$M^{-1} = (2\omega+1) \langle (\omega+1)I + s(B+C) \rangle^{-1} \langle (\omega+1)I - E \rangle^{-1} \gg 0, \quad \omega \gg 0$$

Die Zerlegung  $A = M - N$  ist also regulär, und wegen  $A^{-1} \gg 0$  ist sie auch konvergent für  $\omega \gg 0$ .

Der freie Parameter  $\omega$  kann dazu dienen, den spektralen Radius der Iterationsmatrix  $\rho(T_\omega)$  zu minimieren. Leider sind die Matrizen  $E$  und  $s(B+C)$  weder symmetrisch noch kommutativ, und eine Optimierung des Iterationsverfahrens (5.13) bezüglich des Parameters  $\omega$  ist daher auf analytischem Wege vermutlich nicht möglich.

## Relaxationsverfahren

Ein anderes Iterationsverfahren, bei dem sowohl Elemente der Matrix  $E$  als auch solche von  $B+C$  invertiert werden, ist das Block-Relaxationsverfahren. Die Matrix  $A$  des zu lösenden Gleichungssystems

$$A\phi = k$$

werde zerlegt entsprechend der Gruppierung in Abb. 4:

$$A = D - U - O,$$

worin  $D$  gebildet wird von den quadratischen Diagonal-Matrizen,  $U$  von den Blöcken unterhalb  $D$  und  $O$  von denen oberhalb  $D$ . Das Block-Relaxationsverfahren ist definiert durch

$$(5.14) \quad (D - \omega U) \phi^{(n+1)} = [\omega O + (1 - \omega) D] \phi^{(n)} + \omega k, \quad n = 0, 1, \dots$$

oder ausgeschrieben

$$(5.15) \quad \begin{aligned} \phi_{ij}^-(n+1) - s_{n_i} B_{ij}^- \phi_i(n+1) &= \omega [E_{ij} \phi_{i+1,j}^-(n) + s_{n_i} C_{ij}^- \phi_{i+1}(n)] + \\ &+ (1 - \omega) [\phi_{ij}^-(n) - s_{n_i} B_{ij}^- \phi_i(n)] + \omega p_{ij} \\ \phi_{ij}^+(n+1) - s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+ \phi_i(n+1) &= \omega [E_{i-1,j} \phi_{i-1,j}^+(n+1) + s_{n_{i-1}} C_{i-1,j}^+ \phi_{i-1}(n+1)] \\ &= (1 - \omega) [\phi_{ij}^+(n) - s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+ \phi_{i-1}(n)] + \omega q_{ij} \end{aligned}$$

Man entnimmt der Abb. 4, daß die Matrix  $A$  block-tridiagonal ist. Daraus folgt, daß die Matrix  $A$  2-zyklisch und damit konsistent geordnet ist /7/. Es gilt folgender Satz /13/

Satz 5.7. Die Matrix  $A$  sei konsistent geordnet, und der Spektralradius  $\rho(D^{-1}(U+O))$  der zugehörigen (Block)-Jacobi-Matrix sei  $< 1$ . Dann ist das Iterationsverfahren (5.15) für  $0 < \omega < 2$  konvergent.

Das Relaxationsverfahren (5.14) bietet gegenüber dem ADI-Verfahren (5.13) den Vorteil, daß der Beschleunigungsparameter  $\omega$  optimiert werden kann.  $\mu_\nu$  seien die Eigenwerte der (Block)-Jacobi-Matrix  $D^{-1}(U+O)$  und  $\lambda_\nu$  die Eigenwerte der Relaxationsmatrix  $L_\omega \equiv (D - \omega U)^{-1} [\omega O + (1 - \omega) D]$ , dann besteht zwischen den  $\mu, \lambda$  und  $\omega$  die Beziehung

$$(\lambda + \omega - 1)^2 = \lambda \mu^2 \omega^2$$

Die Eigenwerte  $\mu_\nu$  der Jacobi-Matrix mögen innerhalb der Ellipse

$$\mu = a \cos \Theta + i b \sin \Theta, \quad b \leq a < 1$$

liegen. Dann läßt sich zeigen /13/, daß der spektrale Radius der Relaxationsmatrix  $\rho(L_\omega)$  minimiert wird, wenn

$$\omega_b = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - (a^2 - b^2)}}$$

ist, und in diesem Fall ist

$$\rho(L_\omega) = \frac{a+b}{a-b} (\omega_b - 1)$$

Die quadratischen Diagonalmatrizen in Abb. 4 und somit auch die Matrix  $D - \omega U$  können leicht invertiert werden. Nach (3.13) ist

$$(5.16) \quad \begin{aligned} \phi_{ij}^- - s_{n_i} B_{ij}^- \phi_i &= p_{ij}, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}, \quad j \in \{1, \dots, i\} \\ \phi_{ij}^+ - s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+ \phi_i &= q_{ij}, \quad i \in \{2, \dots, l\}, \quad j \in \{1, \dots, i-1\} \end{aligned}$$

mit

$$\begin{aligned} p_{ij} &\equiv E_{ij} \phi_{i+1,j}^- + \frac{1}{\epsilon_{n_i}^t} [B_{ij}^- \tilde{Q}_i + C_{ij}^- \tilde{Q}_{i+1}] \\ q_{ij} &\equiv E_{i-1,j} \phi_{i-1,j}^+ + \frac{1}{\epsilon_{n_{i-1}}^t} [B_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_i + C_{i-1,j}^+ \tilde{Q}_{i-1}] \end{aligned}$$

und

$$\tilde{Q}_i \equiv \sum_{g' \neq g} \sigma_{gg'n_i}^s \phi_{g'i} + \frac{1}{\lambda} \chi_g \sum_{g'} \sigma_{g'n_i}^f \phi_{g'i}$$

Hinzu kommt die Stetigkeitsbedingung an der Stelle  $x = 0$

$$\phi_{ii}^- = \phi_{ii}^+, \quad i \in \{1, \dots, l\}$$

Diese Differenzengleichungen lassen sich auch folgendermaßen schreiben

$$\begin{aligned} \phi_{ij}^- - s_{n_i} B_{ij}^- \phi_i &= p_{ij}, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}, \quad j \in \{1, \dots, i-1\} \\ \phi_{ii}^- - s_{n_i} B_{ii}^- \phi_i &= p_{ii} \\ \phi_{ij}^+ - s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+ \phi_i &= q_{ij}, \quad i \in \{2, \dots, l\}, \quad j \in \{1, \dots, i-1\} \\ \phi_{ii}^+ - s_{n_i} B_{ii}^+ \phi_i &= p_{ii} \end{aligned}$$

Setzt man

$$q_{ii} \equiv p_{ii}$$

$$B_{i-1,i}^+ \equiv B_{ii}^-$$

$$s \equiv \begin{cases} s_{n_{i-1}}, & j \in \{1, \dots, i-1\} \\ s_{n_i}, & j = i \end{cases}$$

dann ist

$$\phi_{ij}^- - s_{n_i} B_{ij}^- \phi_i = p_{ij}, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}, \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

$$\phi_{ij}^+ - s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+ \phi_i = q_{ij}, \quad i \in \{2, \dots, l\}, \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

Durch Summierung erhält man

$$\sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (\phi_{ij}^- + \phi_{ij}^+) \equiv \phi_i = \phi_i \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (s_{n_i} B_{ij}^- + s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+) + \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (p_{ij} + q_{ij})$$

oder

$$\phi_i = \frac{\sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (p_{ij} + q_{ij})}{1 - \sum_{j=1}^i \alpha_{ij} (s_{n_i} B_{ij}^- + s_{n_{i-1}} B_{i-1,j}^+)}, \quad i \in \{2, \dots, l-1\}$$

Die Winkelflüsse  $\phi_{ij}^-$  und  $\phi_{ij}^+$  ergeben sich durch Einsetzen in (5.16). Für den Fall  $i=1$  ( $r_i=0$ ) erhält man

$$\phi_{11}^- - s_{n_1} B_{11}^- \phi_1 = p_{11}$$

wegen  $\phi_{11}^- = \phi_1$ , ist

$$\phi_{11}^- (1 - s_{n_1} B_{11}^-) = p_{11}$$

$$\phi_{11}^- = \frac{p_{11}}{1 - s_{n_1} B_{11}^-}$$

Für den Fluß am Rand  $r_i=R$  erhält man

$$\phi_{1j}^+ - s_{n_{l-1}} B_{l-1,j}^+ \phi_l = q_{1j}, \quad j \in \{1, \dots, l-1\}$$

$$\phi_{1l}^+ - s_{n_{l-1}} \phi_l = q_{1l}, \quad q_{1l} = \frac{1}{\sigma_{n_{l-1}}} \tilde{Q}_1$$

Wegen der Vakuum-Randbedingung ist  $\phi_l = \sum_{j=1}^l \alpha_{lj} \phi_{lj}^+$  und wegen der Reflexionsbedingung  $\frac{1}{2} \phi_l = \sum_{j=1}^l \alpha_{lj} \phi_{lj}^+$  und daher

$$\sum_{j=1}^l \alpha_{lj} \phi_{lj}^+ = \gamma \phi_l = s_{n_{l-1}} \left( \sum_{j=1}^l \alpha_{lj} B_{l-1,j}^+ + \alpha_{ll} \right) + \sum_{j=1}^l \alpha_{lj} q_{1j}$$

$$\phi_l = \frac{\sum_{j=1}^l \alpha_{lj} q_{1j}}{\gamma - s_{n_{l-1}} \left( \sum_{j=1}^l \alpha_{lj} B_{l-1,j}^+ + \alpha_{ll} \right)}, \quad \gamma = \begin{cases} 1 & \text{- Vakuum-Randbedingung} \\ \frac{1}{2} & \text{- Reflexions-Randbedingung} \end{cases}$$

Die Winkelflüsse am Rand  $\phi_i^+$  ergeben sich ebenfalls durch Einsetzen in (5.16).

Der Rechenaufwand des Iterationsverfahrens (5.15) ( $\omega=1$ ) pro Iteration und Energiegruppe bei einer homogenen Anordnung setzt sich wie folgt zusammen.

$$\begin{aligned} \phi_i &: 6(1-2) + 10 + 1(1-1) \\ \phi_{ij} &: 4I^2 + 1 \quad \text{Punktoperationen,} \\ \text{insgesamt also } 5I^2 + 6I - 2 &= 5I^2 + \mathcal{O}(I) \text{ Punktoperationen.} \end{aligned}$$

## 6. Numerische Ergebnisse und Diskussion

In Abschnitt 5 wurden zur Lösung des in jeder äußeren Iteration auftretenden linearen Gleichungssystems vier Iterationsverfahren (5.7), (5.8), (5.13) und (5.15) angegeben. Für die praktische Anwendung wäre es wichtig zu wissen, welches Verfahren bei vorgegebenen Daten am schnellsten konvergiert. Da eine realistische Abschätzung der Konvergenzraten bei dem in dieser Arbeit behandelten Problem kaum möglich ist, soll das Konvergenzverhalten der Iterationsverfahren anhand numerischer Beispiele studiert werden.

Damit die notwendigen, umfangreichen Rechenoperationen von einer Datenverarbeitungsanlage (IBM/360-75) ausgeführt werden konnten, wurde ein Rechenprogramm (Fortran) geschrieben.

Das Gleichungssystem (5.6) wurde mit der Reflexions-Randbedingung gelöst. Die Inhomogenität wurde null gesetzt. Dann hat das Gleichungssystem nur die triviale Lösung, und die Vektor-Iterierten sind zugleich Fehlervektoren. Die Schätzung  $\phi$  zu Beginn der Iteration betrug  $10^4$ , und es wurde so lange iteriert, bis jede Komponente  $< 1$  war. Die Konvergenzraten wurden in Abhängigkeit von der Schrittlänge  $\Delta\tau$  und dem Verhältnis  $S = \sigma^s / \sigma^t$

studiert. Tabelle 1 enthält neun numerische Beispiele mit  $I=5$ . Die Beispiele eins bis sieben sind physikalisch homogen (charakterisiert durch ein  $s$ ) und haben eine gleichförmige Intervallteilung  $\Delta r_i$ . Schrittlänge und das Verhältniss im ersten Beispiel entsprechen einem stark absorbierenden Material. Die Daten der Beispiele zwei bis sieben reichen von einer kleinen schnellen Anordnung(2) bis zur großen und gut thermalisierten Anordnung(7). Man entnimmt der Tabelle, daß das Punkt-Iterationsverfahren (5.7) für kleine Werte  $\Delta r_i$  und  $s$  gut und für große Werte sehr schlecht konvergiert. Das Block-Iterationsverfahren (5.8) zeigt entgegengesetztes Verhalten: es konvergiert für große Werte von  $\Delta r_i$  und  $s$  sehr gut und für kleine Werte mäßig. Dieses Ergebnis war dem Verlauf des Koeffizienten (Anhang) nach zu erwarten. Einen großen Fortschritt bringt daher die Kombination beider Verfahren, das ADI-Verfahren mit dem Parameter  $\omega=0$ , das in allen Fällen gut konvergiert. Auch das SOR-Verfahren, das für  $\omega=1$  (Block-Gauß-Seidel-Verfahren) untersucht wurde, zeigt nicht den extremen Verlauf der beiden ersten Verfahren, sondern konvergiert befriedigend. Allerdings besteht hier noch die Möglichkeit, den Parameter  $\omega$  zu optimieren.

Beispiel 8 ist eine heterogene Anordnung mit ungleichförmiger Intervallteilung bzgl.  $r$ ; Hier wurden die Beispiele 1 und 7 kombiniert. Dieses Beispiel soll als Idealisierung einer großen und gut thermalisierten Anordnung dienen, in die ein Absorber eingebracht wurde. Wie die Tabelle zeigt, ist das Punkt-Iterationsverfahren in diesem Fall unbrauchbar; jedoch sind die drei anderen Verfahren sehr gut konvergent. Beispiel 9 ist eine heterogene Anordnung mit einem Gebiet, in dem sämtliche Wirkungsquerschnitte verschwinden. Es soll als Idealisierung einer großen und gut thermalisierten Anordnung mit einem Hohlraum dienen. In diesem Fall entnimmt man der Tabelle, daß das Punkt-Iterationsverfahren wiederum unbrauchbar ist, das Block-Iterationsverfahren bereits wesentlich besser konvergiert und noch besser das SOR- $(\omega=1)$ - und das ADI- $(\omega=0)$ -Verfahren.

Numeri- sches Beispiel	Schrittlänge $\Delta r_i$ in cm	$s = \frac{\sigma^s}{\sigma^t}$	Zahl d. Iterationen			
			PI	BI	ADI ( $\omega=0$ )	SOR ( $\omega=1$ )
1	0.05	0.01	36	162	36	118
2	0.1	0.1	20	85	20	62
3	0.5	0.5	17	22	10	19
4	1	0.8	45	17	12	19
5	5	0.9	88	3	3	9
6	10	0.97	303	2	2	11
7	50	0.99	917	1	1	9
8	50; 0.05; 0.05; 50	0.99; 0.01; 0.01; 0.99	850	17	8	11
9	50	0.99; 0 ; 0 ; 0.99	917	388	172	218

Tabelle 1. Konvergenzraten der vier Iterationsverfahren.

#### Bemerkungen

1) Der Anstieg der Zahl der Iterationen beim Punkt-Iterationsverfahren für kleine Werte von  $\Delta r_i$  und  $s$  wird durch den Punkt ( $x=0, y=R$ ) verursacht. Für den Fluß in diesem Punkt gilt die Beziehung (3.14), die sich von den Differenzengleichungen für die anderen Maschenpunkte umso mehr unterscheidet, je kleiner die Werte für  $\Delta r_i$  und  $s$  sind.

2) Erfahrungsgemäß ist die Konvergenz der Iterationsverfahren bei Verwendung der Vakuum-Randbedingung besser.

Zusammenfassend kann man sagen, daß das ADI-( $\omega=0$ )- und das SOR-( $\omega=1$ )-Verfahren schnell konvergierende Verfahren sind; das ADI-( $\omega=0$ )-Verfahren ist noch etwas besser. Auch das Block-Iterationsverfahren ist noch brauchbar. Hingegen ist das Punkt-Iterationsverfahren nur mit Einschränkung zu verwenden.

Für die folgenden drei numerischen Beispiele wurde das partielle Eigenwertproblem (4.8) gelöst.

Beispiel 10. Thermische Anordnung mit Reflektor.

2 Energiegruppen, Radius des Cores  $1,5 \cdot 10^2$  cm, Radius des Reflektors  $2,5 \cdot 10^2$  cm;

Wirkungsquerschnitte:

Gruppe $g$	Core			
	$\nu \sigma_g^f$	$\sigma_g^t$	$\sigma_{gg}^s$	$\sigma_{g \rightarrow g}^s$
1	0	0.33	0.32	0
2	0.05715	0.33	0.28	0.009

Reflektor				
1	0	0.35	0.34	0
2	0	0.353	0.35	0.009

Größter Eigenwert  $\lambda = 0.995$

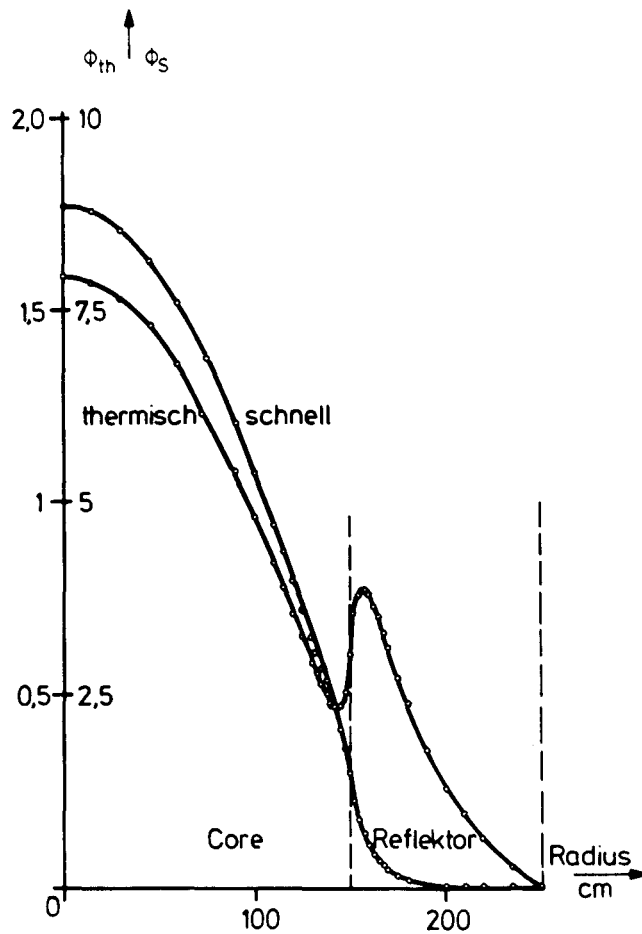


Abb. 6.1. Schneller und thermischer Fluß  $\phi(r)$  für eine thermische Anordnung mit Reflektor.



Beispiel 11. Thermische Anordnung mit Reflektor und zentralem Absorber.

2 Energiegruppen, Radius des Absorbers 5 cm, Radius des Cores  $1,5 \cdot 10^2$  cm, Radius des Reflektors  $2,5 \cdot 10^2$  cm; Wirkungsquerschnitte in Core und Reflektor wie im Beispiel 10.

Gruppe $g$	Absorber			
	$\nu \sigma_g^f$	$\sigma_g^t$	$\sigma_{gg}^s$	$\sigma_{g-1 \rightarrow g}^s$
1	0	0.33	0.32	0
2	0	1.28	0.28	0.009

Größter Eigenwert  $\lambda = 0.935$

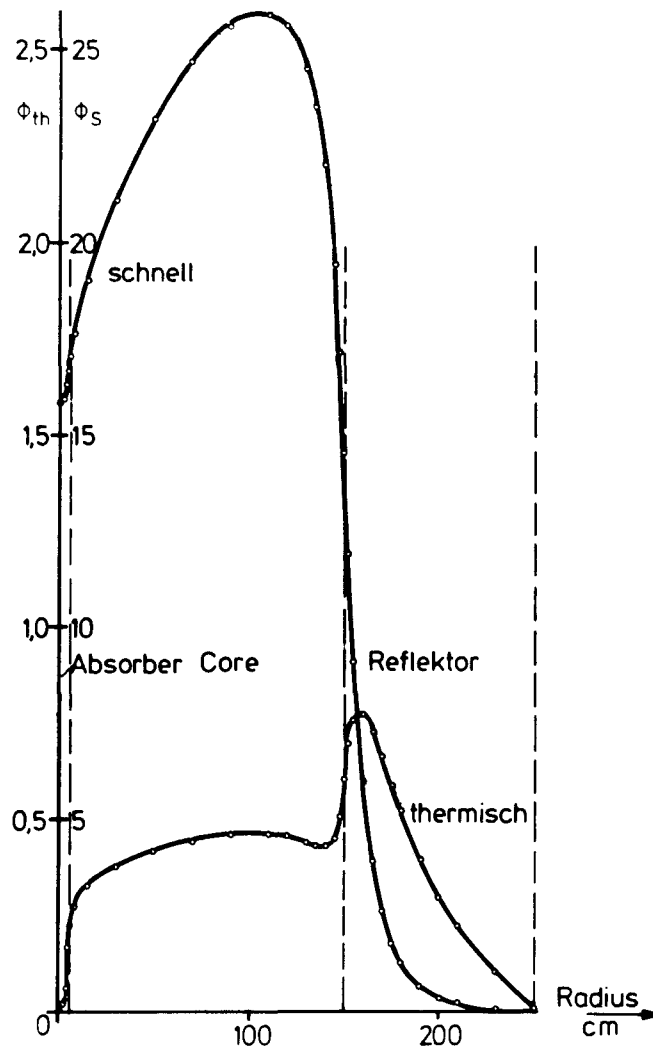


Abb. 6.2. Schneller und thermischer Fluß  $\phi(r)$  für eine thermische Anordnung mit Reflektor und zentralem Absorber.

Beispiel 12. Thermische Anordnung mit Hohlraum und Reflektor.

2 Energiegruppen, Radius des Cores  $1,5 \cdot 10^2$  cm, Radius des Hohlraumes  $2,0 \cdot 10^2$  cm, Radius des Reflektors  $3,0 \cdot 10^2$  cm; Wirkungsquerschnitte im Hohlraum = 0, in Core und Reflektor wie in Beispiel 10; größter Eigenwert  $\lambda = 0,945$ .

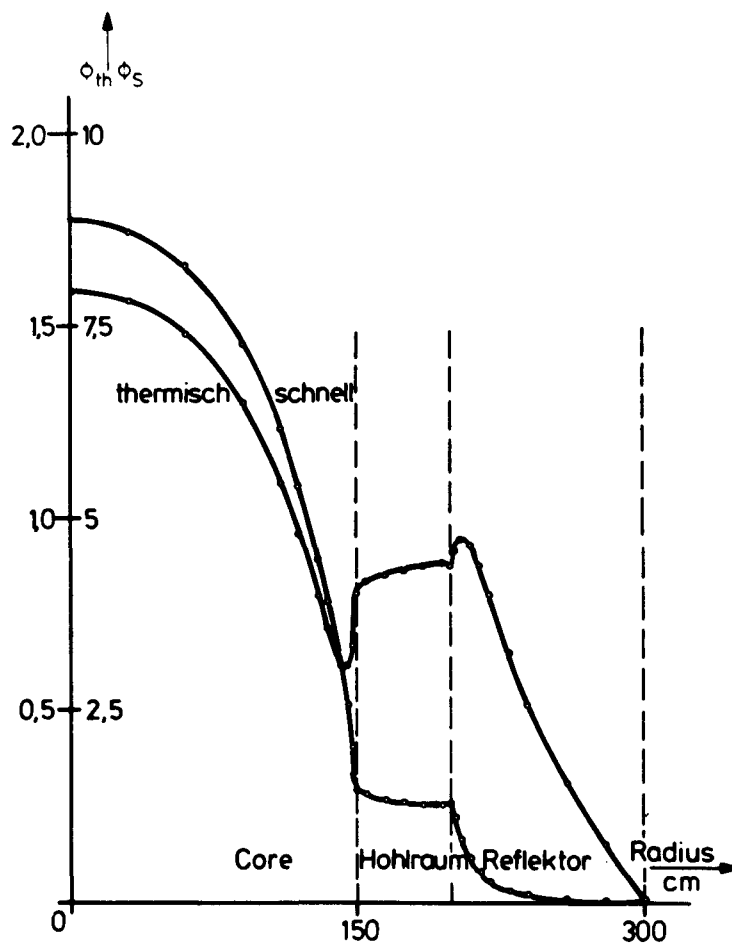


Abb. 6.3. Schneller und thermischer Fluß  $\phi(r)$  für eine thermische Anordnung mit Hohlraum und Reflektor.

## 7. Anhang

Im folgenden soll das Vorzeichen der Matrixelemente untersucht werden. Es wird im wesentlichen bestimmt durch den Verlauf der Koeffizienten  $B_{gij}^{\mp}$  und  $C_{gij}^{\mp}$  in den Gln. (3.13). Für  $x_{ij} \leq 0$  ist

$$\Delta x_{ij} \equiv |x_{i+1j} - x_{ij}| = x_{ij} - x_{i+1j}, \quad i \in \{1, \dots, l-1\}, \quad j \in \{1, \dots, i\}$$

$$\tau_{i+1}^2 - \tau_i^2 = x_{i+1j}^2 - x_{ij}^2 = (x_{ij} - \Delta x_{ij})^2 - x_{ij}^2 = \Delta x_{ij} (\Delta x_{ij} - 2x_{ij})$$

und daher

$$\begin{aligned} Z_{gij}^{-} &\equiv \frac{2}{G_g^t(\tau_{i+1}^2 - \tau_i^2)} \left[ (1 - G_g^t x_{i+1j})(1 - E_{gij}) - G_g^t \Delta x_{ij} \right] \\ &= \frac{2}{G_g^t \Delta x_{ij} (G_g^t \Delta x_{ij} - 2G_g^t x_{ij})} \left[ (1 + G_g^t \Delta x_{ij} - G_g^t x_{ij})(1 - E_{gij}) - G_g^t \Delta x_{ij} \right] \\ &= \frac{2}{2\xi + \Delta} \left[ \alpha(1 + \xi + \Delta) - 1 \right] \end{aligned}$$

mit  $\xi \equiv G_g^t |x_{ij}|$ ,  $\Delta \equiv G_g^t \Delta x_{ij}$ ,  $\alpha(\Delta) \equiv \frac{1}{\Delta} \langle 1 - \exp(-\Delta) \rangle$

Ebenso erhält man für  $x_{ij} > 0$

$$\Delta x_{ij} = x_{i+1j} - x_{ij}$$

$$\tau_{i+1}^2 - \tau_i^2 = \Delta x_{ij} (\Delta x_{ij} + 2x_{ij})$$

und

$$\begin{aligned} Z_{gij}^{+} &\equiv \frac{2}{G_g^t(\tau_{i+1}^2 - \tau_i^2)} \left[ (G_g^t x_{ij} - 1)(1 - E_{gij}) + G_g^t \Delta x_{ij} \right] \\ &= \frac{2}{G_g^t \Delta x_{ij} (G_g^t \Delta x_{ij} + 2G_g^t x_{ij})} \left[ (G_g^t x_{ij} - 1)(1 - E_{gij}) + G_g^t \Delta x_{ij} \right] \\ &= \frac{2}{2\xi + \Delta} \left[ (\xi - 1)\alpha + 1 \right] \end{aligned}$$

Die weitere Diskussion der Funktionen

$$Z^-(\xi, \Delta) \equiv \frac{2}{2\xi + \Delta} [\alpha(\xi + \Delta) - (1 - \alpha)], \quad x_{ij} \leq 0$$

$$Z^+(\xi, \Delta) \equiv \frac{2}{2\xi + \Delta} [\alpha\xi + 1 - \alpha], \quad x_{ij} > 0$$

wird erleichtert, wenn man sich den Verlauf folgender Funktionen in die Erinnerung ruft

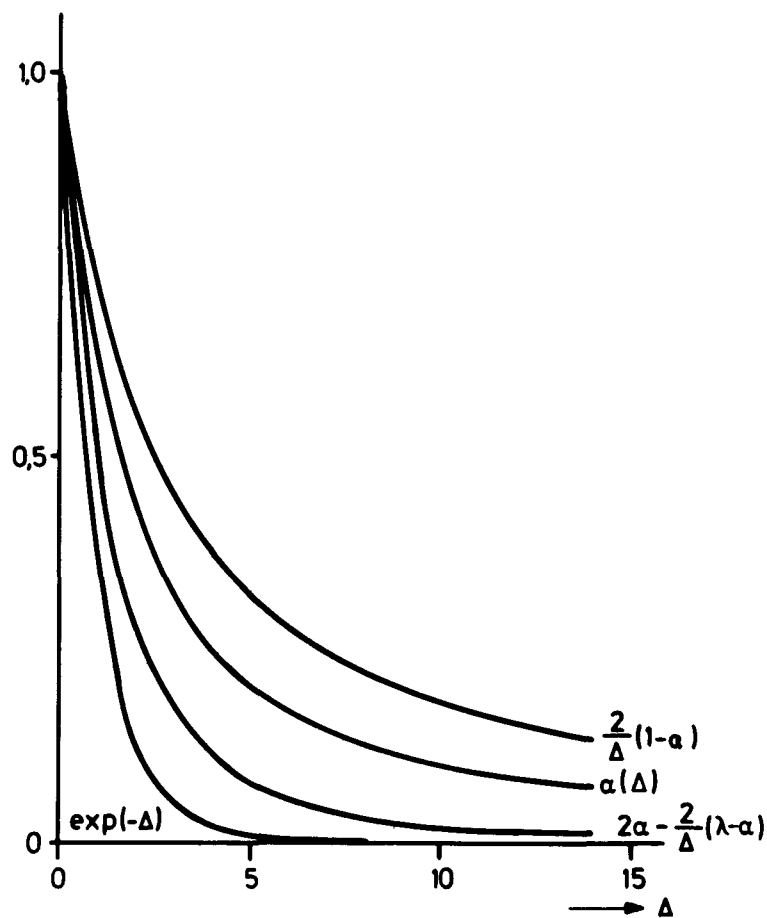


Abb. 5. Darstellung der im Text verwendeten Funktionen in Abhängigkeit von  $\Delta$ .

Es werde vorausgesetzt, daß  $\Delta \neq 0$  ist.

1. Fall:  $x_{ij} \leq 0$ .

$$Z^-(\xi, \Delta) \equiv \frac{2}{2\xi + \Delta} [\alpha(\xi + \Delta) - (1 - \alpha)]$$

$$\frac{\partial Z^-(\xi, \Delta)}{\partial \xi} = \frac{2\Delta}{(2\xi + \Delta)^2} \left[ \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) - \alpha \right] > 0$$

$$\frac{\partial^2 Z^-(\xi, \Delta)}{\partial \xi^2} = -\frac{8\Delta}{(2\xi + \Delta)^3} \left[ \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) - \alpha \right] < 0$$

$$Z^-(0, \Delta) = \frac{2}{\Delta} [\Delta\alpha - (1 - \alpha)] = 2\alpha - \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) > 0$$

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} Z^-(\xi, \Delta) = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{2\alpha(\xi + \Delta)}{2\xi + \Delta} = \alpha$$

Da  $Z^-(\xi, \Delta)$  im Intervall  $0 \leq \xi < \infty$  eine monoton steigende Funktion ist, folgt  $2\alpha - \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) \leq Z^-(\xi, \Delta) < \alpha$ . Wegen  $\alpha(\Delta) < 1$  und  $\exp(-\Delta) < 2\alpha - \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha)$  sind die Koeffizienten  $B_{gij}^- \equiv 1 - Z_{gij}^-$  und  $C_{gij}^- \equiv Z_{gij}^- - E_{gij}$  positiv.

2. Fall:  $x_{ij} > 0$ .

$$Z^+(\xi, \Delta) \equiv \frac{2}{2\xi + \Delta} [\alpha\xi + 1 - \alpha]$$

$$\frac{\partial Z^+(\xi, \Delta)}{\partial \xi} = \frac{2\Delta}{(2\xi + \Delta)^2} \left[ \alpha - \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) \right] < 0$$

$$\frac{\partial^2 Z^+(\xi, \Delta)}{\partial \xi^2} = -\frac{8\Delta}{(2\xi + \Delta)^3} \left[ \alpha - \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) \right] > 0$$

$$Z^+(0, \Delta) = \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha)$$

$$\lim_{\xi \rightarrow \infty} Z^+(\xi, \Delta) = \lim_{\xi \rightarrow \infty} \frac{2\alpha(\xi + 1)}{2\xi + \Delta} = \alpha$$

$Z^+(\xi, \Delta)$  ist im Intervall  $0 \leq \xi < \infty$  eine monoton fallende Funktion, daher ist  $\alpha < Z^+(\xi, \Delta) \leq \frac{2}{\Delta} (1 - \alpha)$ . Wegen  $\frac{2}{\Delta} (1 - \alpha) < 1$  und  $\exp(-\Delta) < \alpha$  sind die Koeffizienten  $B_{gij}^+ \equiv 1 - Z_{gij}^+$  und  $C_{gij}^+ \equiv Z_{gij}^+ - E_{gij}$  positiv.

Die Funktion  $Z(\xi, \Delta) = \begin{cases} Z^-(\xi, \Delta) & \text{für } x_{ij} \leq 0 \\ Z^+(\xi, \Delta) & \text{für } x_{ij} > 0 \end{cases}$  ist in Abb. 6 dargestellt

Die beiden Zweige verlaufen symmetrisch zur Horizontalen  $\alpha$ .

Der Wert der Funktion  $Z(\xi, \Delta)$  hängt also von der Lage des Gitterpunktes und von der Maschenweite ab. Für sehr kleine Maschenweiten ist  $Z(\xi, \Delta)$  groß ( $\approx 1$ ) und  $B \approx 1-Z$  klein, und für große Maschenweiten ist  $Z(\xi, \Delta)$  klein und  $B$  groß.

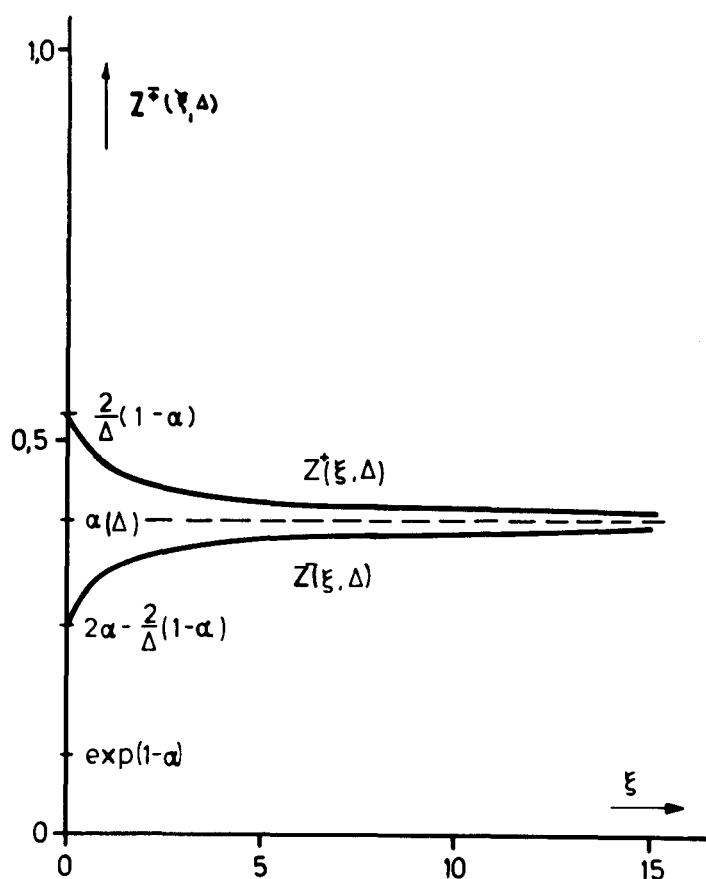


Abb. 6. Darstellung der Funktion  $Z(\xi, \Delta)$  in Abhängigkeit von  $\xi$  für  $\Delta = 2,25$ .

## 8. Literatur

- /1/ B.G. Carlson, The  $S_N$ -Method and the SNG Code,  
Los Alamos Scientific Laboratory, LAMS-2201(1958)
- /2/ B.G. Carlson, Numerical Solution of Neutron Transport  
Problems, Proceedings of Symposia in Applied Mathematics,  
Vol. 11 (1961)
- /3/ F. Ebersold, Untersuchungen zum Problem der charakteristi-  
schen Werte und nicht-negativen Lösungen einer verallgemei-  
nerten stationären Transport-Gleichung, Jül-711-MA(1970)
- /4/ G. Birkhoff and R.S. Varga, Reactor Criticality and  
Non-Negative Matrices, WAPD-166 (1957)
- /5/ D. Emendörfer und K.H. Höcker, Theorie der Kernreaktoren,  
Teil II, BI Hochschultaschenbücher, Mannheim 1969
- /6/ G.J. Marchuk, Numerical Methods for Nuclear Reactor  
Calculation (engl. transl.),  
Consultants Bureau Inc., New York (1959)
- /7/ R.S. Varga, Matrix Iterative Analysis,  
Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1962)
- /8/ E.L. Wachspress, Iterative Solution of Elliptic Systems,  
Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, New Jersey (1966)
- /9/ K. Fan, Topological Proofs for Certain Theorems on Matrices  
with Non-Negative Elements, Mh. Math., 62 (1958), 219
- /10/ R. Froehlich, Positivity Theorems for the Discrete Form  
of the Multigroup Diffusion Equation, Nucl.Sci.Eng.34(1968),  
57-66

- /11/ L.A. Hageman, Numerical Methods and Techniques Used in the Two-Dimensional Neutron-Diffusion Program PDQ-5, WAPD-TM-364 (1963)
- /12/ D.N. Peaceman and H.H. Rachford Jr., "The Numerical Solution of Parabolic and Elliptic Differential Equations", J. of Soc. Industr. Appl. Math. 3 (1955), 28-41
- /13/ G. Kjellberg, On the Convergence of Successive Overrelaxation Applied to a Class of Linear Systems of Equations with Complex Eigen-Values, Ericsson Technics, 13/14 (1957/1958)
- /14/ H. Werner, Praktische Mathematik I, Mathematica Scripta 1, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1970)
- /15/ J.H. Wilkinson, Rundungsfehler, Heidelberger Taschenbücher Bd. 44, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, New York (1969)